



11

И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, В. В. Устинов
**Фокусировка фононов и фононный транспорт
в монокристаллических наноструктурах**

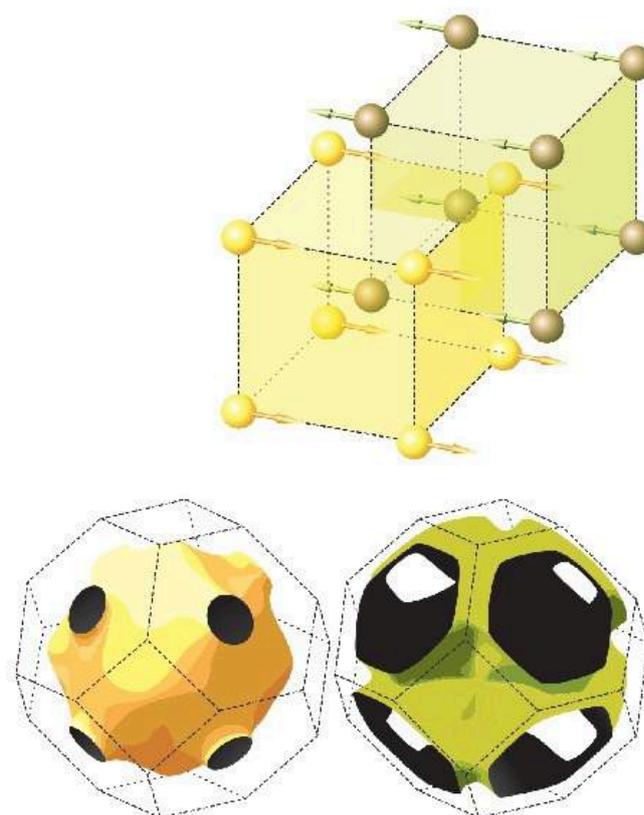
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

11

СИСТЕМА
КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕД

И. Г. Кулеев
И. И. Кулеев
С. М. Бахарев
В. В. Устинов

Фокусировка фононов и фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах



Екатеринбург



**Кулеев
Игорь Гайнитдинович**

Доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института физики металлов УрО РАН. Автор более 100 научных работ. Область научных интересов: теория кинетических эффектов в металлах, полупроводниках и в системах со смешанной валентностью; изучение роли взаимного увлечения электронов и фононов, а также нормальных процессов рассеяния квазичастиц в термогальваномагнитных явлениях в металлах и полупроводниках; исследование поглощения ультразвука и релаксации фононов в кубических кристаллах с различным изотопическим составом; исследование фокусировки фононов и фононного транспорта в объёмных кристаллах и наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии.

ла, полупроводниках и в системах со смешанной валентностью; изучение роли взаимного увлечения электронов и фононов, а также нормальных процессов рассеяния квазичастиц в термогальваномагнитных явлениях в металлах и полупроводниках; исследование поглощения ультразвука и релаксации фононов в кубических кристаллах с различным изотопическим составом; исследование фокусировки фононов и фононного транспорта в объёмных кристаллах и наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии.



**Кулеев
Иван Игоревич**

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института физики металлов УрО РАН. Область научных интересов: исследование роли нормальных процессов рассеяния квазичастиц (электронов и фононов) в формировании кинетических свойств металлов и полупроводников; изучение физических процессов, определяющих фононный транспорт и поглощение ультразвука в диэлектрических кристаллах с различной степенью изотопического беспорядка; изучение фокусировки и рассеяния фононов на границах объёмных и наноразмерных образцов. Автор более 30 научных работ.

процессов рассеяния квазичастиц (электронов и фононов) в формировании кинетических свойств металлов и полупроводников; изучение физических процессов, определяющих фононный транспорт и поглощение ультразвука в диэлектрических кристаллах с различной степенью изотопического беспорядка; изучение фокусировки и рассеяния фононов на границах объёмных и наноразмерных образцов. Автор более 30 научных работ.



**Бахарев
Сергей Михайлович**

Кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института физики металлов УрО РАН. Научные интересы связаны с теоретическим исследованием релаксации фононов в кубических кристаллах с различным изотопическим составом; исследованием фокусировки фононов и фононного транспорта в объёмных кристаллах и наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии.

нием релаксации фононов в кубических кристаллах с различным изотопическим составом; исследованием фокусировки фононов и фононного транспорта в объёмных кристаллах и наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии.



**Устинов
Владимир Васильевич**

Академик РАН, главный научный сотрудник, заведующий отделом наноспинтроники Института физики металлов УрО РАН.

Основное направление научной деятельности – поверхностные и размерные эффекты в кинетике и спиновой динамике электронов проводимости в магнитных наноструктурах. Руководитель ведущей научной школы России по наноспинтронике. Автор более 250 научных работ. Удостоен Премии РАН имени А. Ф. Иоффе за цикл работ «Спиновые явления в полупроводниковых, металлических и магнитных наноструктурах».

НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ СЕРИЯ

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Основана Институтом физики металлов
УрО РАН в 2009 г.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ
«Физика конденсированных сред»

академик РАН В.В. Устинов (главный редактор)

академик РАН Н.В. Мушников

академик РАН М.В. Садовский

академик РАН В.М. Счастливцев

чл.-корр. РАН А.Б. Борисов

чл.-корр. РАН Б.Н. Гощицкий

чл.-корр. РАН А.Б. Ринкевич

чл.-корр. РАН В.Е. Щербинин

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ

НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ СЕРИЯ
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

11

И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, В. В. Устинов

**ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ И
ФОНОННЫЙ ТРАНСПОРТ В
МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
НАНОСТРУКТУРАХ**

ЕКАТЕРИНБУРГ
2018

УДК 537.9
ББК 22.37

Рекомендовано к изданию Ученым Советом
Института физики металлов имени М.Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук

Кулеев И.Г., Кулеев И.И., Бахарев С.М., Устинов В.В.

Фокусировка фононов и фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах / И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, В.В. Устинов – Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2018, 256 с. (Научно-образовательная серия «Физика конденсированных сред»; 11).
ISBN 978-5-8295-0562-2

Монография посвящена исследованию физических процессов, определяющих фононный транспорт в объемных и наноразмерных монокристаллических образцах материалов кубической симметрии. В основу монографии положен цикл работ, выполненных авторами за последние шесть лет. Основное внимание уделено исследованию фокусировки фононов и её влияния на распространение фононов в кубических кристаллах, граничное рассеяние и решеточную теплопроводность объёмных материалов и наноструктур. Дано аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. Исследован фононный транспорт в наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии при низких температурах, когда доминирующим механизмом релаксации является диффузное рассеяние фононов на границах. Рассмотрено влияние фокусировки фононов на зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров наноструктур для различных направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок относительно осей кристалла. Определены ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный тепловод от элементов полупроводниковых микросхем. Рассчитаны температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов и тонких пленок в рамках трехмодовой модели Каллавея.

Монография адресована научным работникам - специалистам в области физики конденсированного состояния вещества, а также аспирантам, преподавателям и студентам физических и технических вузов.

УДК 537.9
ББК 22.37

Ответственный редактор
доктор физико - математических наук **А.П. Танкеев**

Рецензент
доктор физико - математических наук **И.И. Ляпилин**

ISBN 978-5-8295-0562-2 © Институт физики металлов УрО РАН, 2018 г.
© Кулеев И.Г., Кулеев И.И., Бахарев С.М.,
Устинов В. В., 2018 г.

ВВЕДЕНИЕ

Монография посвящена исследованию физических процессов, определяющих фононный транспорт в объемных и наноразмерных монокристаллических образцах кубической симметрии. Важным аспектом этой проблемы является изучение влияния фокусировки на распространение фононных мод и теплопроводность монокристаллических пленок и нанопроводов, а также дисперсии и механизмов релаксации импульса фононов, обуславливающих зависимости кинетических характеристик от температуры и геометрических параметров для различных направлений теплового потока в нанопроводах и ориентации плоскостей пленок.

В связи с развитием технологии изготовления и широким использованием нанопленок и нанопроводов в микроэлектронике значительно возрос интерес к исследованию их теплопроводящих свойств [1-7]. Особенности фононного транспорта в таких структурах обусловлены тем, что длины свободного пробега фононов в широком температурном интервале оказываются больше или сравнимы с характерными размерами образцов нанометрового диапазона. Поэтому рассеяние фононов на границах играет важную роль в теплосоппротивлении наноразмерных материалов в интервале температур от гелиевых до комнатных. В этом случае длина свободного пробега фононов определяется характером взаимодействия фононов с поверхностью. Такую ситуацию, когда доминирующим механизмом релаксации является диффузное рассеяние фононов на границах, принято называть режимом граничного рассеяния фононов. Согласно [8,9], диффузный характер рассеяния фононов реализуется, если геометрические параметры шероховатостей на границе образца будут больше или сравнимы с длиной волны фонона. В объемных материалах режим граничного рассеяния фононов реализуется при достаточно низких температурах, когда фонон-фононные механизмы релаксации вымораживаются. В этом случае распространение потока тепла по диэлектрическому стержню, согласно работам [8,9], можно рассматривать аналогично течению разреженного газа по трубе. В случае потока разреженного молекулярного газа по трубе столкновениями молекул газа между собой можно пренебречь и счи-

тать, что величина потока определяется характером взаимодействия молекул с поверхностью (см., например, [10-11]). Кнудсен в 1909 году решил задачу о течении 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 [12].

Впервые задачу о теплопроводности тонкого диэлектрического стержня бесконечной длины в модели изотропной среды рассмотрел Казимир [13] в 1938 г. Он проанализировал случай диффузного рассеяния фононов на границах образца. Казимир предположил, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца с интенсивностью, которая зависит от температуры поверхности в соответствии с теорией излучения абсолютно черного тела. Он нашел, что длина свободного пробега фононов в цилиндрическом стержне бесконечной длины равна его диаметру. В связи с этим длины пробега фононов в образцах бесконечной длины получили название длин Казимира. Полученный результат совпадает с результатом Кнудсена [12] для течения разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с круглым сечением. Поэтому режим граничного рассеяния фононов получил название кнудсеновского течения фононного газа. Позже Берман с коллегами рассмотрели влияние частично зеркального отражения фононов от поверхности образца, а также эффект конечной длины на теплопроводность в режиме граничного рассеяния [14-15]. Было показано, что учет конечной длины приводит к уменьшению теплопроводности по сравнению с бесконечным образцом на величину порядка отношения ширины образца к его длине. Однако аналитических выражений для поправок к теплопроводности из-за конечной длины образца найдено не было.

Анизотропия упругих свойств кристаллов приводит к ряду новых эффектов в фононном транспорте. Одним из таких эффектов является фокусировка фононов. В работах [16-18] показано, что из-за неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононный поток, излучаемый точечным источником тепла, фокусируется вдоль определенных направлений в кристаллической решетке. Экспериментальные исследования, проведенные в работе МакКарди и др. [19] показали, что фокусировка фононов приводит к двум эффектам в теплопроводности

кубических кристаллов в режиме граничного рассеяния. Первым эффектом является зависимость теплопроводности $\kappa(T)$ от направления градиента температуры T относительно кристаллографических осей: для образцов Si с квадратным сечением величина теплопроводности при низких температурах в направлении $[001]$ оказалась на 40% и 50% больше, чем в направлениях $[011]$ и $[111]$. Для кристаллов CaF_2 – наоборот: в направлении $[001]$ теплопроводность оказалась на 40% меньше, чем в направлении $[111]$. Вторым эффектом является зависимость величин теплопроводности образцов с прямоугольным сечением при низких температурах от ориентации боковых граней. Для двух исследованных в [19] образцов, имеющих одинаковые геометрические параметры и направление градиента температуры $[110]$, оказалось, что теплопроводность образца с широкой гранью $\{001\}$ и узкой $\{110\}$ на 33% выше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$ и узкой $\{001\}$. При температурах выше максимума $\kappa(T)$ длина свободного пробега фононов становится меньше поперечных размеров образца, теплопроводность кубических кристаллов становится изотропной — она не зависит от направления потока тепла в кристалле.

В работе [19] теория Казимира 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 направлению теплового потока. В этих предположениях были рассчитаны длины свободного пробега фононов в образцах Si и CaF_2 для симметричных направлений при температуре 3К. Рассчитанные значения согласовывались с экспериментальными данными при $T=3\text{К}$ с погрешностью, не превышающей 8% [19]. Получить аналитические выражения для времен релаксации фононов в рамках теории Казимира [13] при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины и рассчитать температурные зависимости теплопроводности авторам [19] не удалось. Поэтому за сорок лет со времени публикации [19] не было выполнено ни одной работы, в которой анализировались бы температурные зависимости теплопроводности диэлектрических кристаллов с учетом фокусировки фононов. Такой расчет удалось выполнить в работах [20-21]. Это позволило определить времена релаксации фононов различных поляризаций при диффузном рассеянии фононов на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями в

виде кусочно-гладких функций для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами образцов.

Для того, чтобы корректно объяснить обнаруженные в работе [19] эффекты, при расчете теплопроводности монокристаллических образцов необходимо ввести два ориентационных параметра, которые учитывают зависимости кинетических характеристик от направления теплового потока $[L]$ и ориентации плоскости пленки (или широкой грани образца) $\{J\}$. Этот метод учета фокусировки фононов развит в работе [22], где показано, что ориентационные параметры $[L]$ и $\{J\}$ могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока. Использование этого метода и аналитических решений [20-21] позволило в [22] адекватно описать экспериментальные данные по теплопроводности кристаллов кремния [19] во всем диапазоне температур для всех направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней для образцов с прямоугольным сечением.

До настоящего времени при анализе температурных зависимостей теплопроводности для скоростей релаксации фононов на границах и в ангармонических процессах рассеяния всегда вводились подгоночные параметры, которые призваны компенсировать недостатки (или дефекты) теоретических моделей, положенных в основу их расчетов. Для граничного рассеяния фононов эти параметры вводились для учета влияния геометрических параметров и ориентаций боковых граней образцов, а также направлений теплового потока на теплопроводность полупроводниковых и диэлектрических кристаллов. Аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа позволило избавиться от них для граничного рассеяния фононов. Показано, что в интервале температур от 3 до 15 К, когда доминирует рассеяние фононов на границах и изотопическом беспорядке, наша теория количественно описывает температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния для всех направлений теплового потока в образцах с квадратным сечением и зависимость от ориентации боковых граней для образцов с прямоугольным сечением, без использования подгоночных параметров. Метод учета фокусировки фононов [20-22] при расчете релаксационных характеристик фононов и фононного транспорта в упруго анизотропных кристаллах использован в работах [23-24] для

анализа температурных зависимостей 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. В трехмодовой модели Каллавея получено хорошее согласие с экспериментальными данными [4-7] для теплопроводности пленок и нанопроводов в интервале температур от 20К до 350К.

Предложенный метод является актуальным, поскольку в значительном числе публикаций, посвященных исследованию фононного транспорта в пленках и нанопроводах, эффекты, обусловленные фокусировкой фононов, не учитывались. Так, например, в работах [25-26] для граничного рассеяния в наноструктурах на основе кремния и алмаза использовалась теория Казимира [13], справедливая только для модели изотропной среды. При изложении экспериментальных результатов в обзорах [1-3] также использовалась модель изотропной среды: не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей. В работах [23,27] показано, что в зависимости от направления градиента температуры величины теплопроводности нанопроводов могут изменяться в 1.5 – 2 раза, а изменение ориентации плоскости пленки может приводить к увеличению значений теплопроводности в 2-2.5 раза. Поэтому отсутствие такой информации делает эти данные малоинформативными. Очевидно, что использование модели изотропной среды при интерпретации экспериментальных данных по теплопроводности наноструктур может приводить к погрешности до 250%.

В работах [5-7, 28, 29] граничное рассеяние фононов в достаточно тонких пленках (толщина пленки гораздо меньше её ширины) учитывалось в модели изотропной среды аналогично тому, как это было сделано в работах Фукса [30] и Зондгеймера [31] при анализе проводимости тонких металлических пленок. При этом предполагалось, что длины свободного пробега и времена релаксации фононов в пленках зависят только от её толщины [5-7, 28-31]. Этот результат некорректен. Согласно [25, 32] теплопроводность пленок и длин пробега фононов в модели изотропной среды не только существенным образом зависит от геометрических размеров, но и более того, длины Казимира для них логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности. Как отмечено в [24, 31], эта расходимость обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. Ранее вопрос о влиянии конечной длины пленки на расходимость длин Казимира

мира не рассматривался. Также не исследовались такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости теплопроводности от геометрических параметров наноструктур, 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 наноструктур [1-7, 28, 29]. Поэтому обсуждению этих проблем будет уделено большое внимание. В работе [27] рассмотрено влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости теплопроводности пленок от геометрических параметров и показано, что учет конечной длины пленки приводит к устранению этой расходимости.

Исследование зависимости теплопроводности наноструктур от геометрических параметров представляет интерес для технических приложений развитой в настоящей монографии теории. Одной из важных задач настоящей работы является анализ влияния фокусировки на распространение фононных мод и анизотропию теплопроводности монокристаллических пленок и нанопроводов в рамках феноменологического метода Казимира – МакКарди [13,19]. Этот метод предполагает использование трехмерного спектра фононов, поэтому возникают естественные ограничения на диаметры нанопроводов и толщины пленок, при которых влиянием пространственного конфаймента на спектр акустических мод можно пренебречь. Анализ, проведенный в работах [4-7, 23,24] показал, что для нанопроводов с диаметрами большими 50 нм и пленок с толщинами большими 20 нм в интервале температур от 20 до 50 К теплопроводность следовала зависимости $\kappa(T) \sim T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при указанных ограничениях влиянием пространственного конфаймента на спектр акустических мод можно пренебречь. Расчеты температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок и нанопроводов в [23, 24] подтвердили этот вывод.

Следует отметить, что использование численных методов, таких как метод молекулярной динамики, не дает пока достаточно надежных результатов при расчете температурных зависимостей теплопроводности

сти с учетом фокусировки фононов. Расчет теплопроводности в [33, 34] в симметричных направлениях привел к взаимно противоположным результатам для анизотропии теплопроводности. В работе [34] получено, что теплопроводность алмазных нанопроводов в направлениях [011] значительно больше, чем в направлениях [001] и [111]. Этот результат противоречит экспериментальным данным МакКарди и др. [19] и нашему анализу. Согласно [19-22] 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 этих направлениях. Результаты [33] для анизотропии теплопроводности качественно согласуются с расчетами [20-21] и экспериментальными данными [19]. Однако, согласно расчетам [33], значительная анизотропия теплопроводности имеет место при температурах, значительно превышающих температуру максимума теплопроводности. Это противоречит результатам [19], из которых следует, что при температурах выше максимума теплопроводности происходит переход к объемным механизмам релаксации, и анизотропия теплопроводности быстро исчезает.

В первой главе проанализировано уравнение Кристоффеля и рассчитаны динамические характеристики фононов в кубических кристаллах в модели анизотропного континуума. Показано, что в зависимости от величины параметра анизотропии все кубические кристаллы могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной и отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка. Предложен метод аппроксимации фононного спектра кубических кристаллов, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений, на всю зону Бриллюэна. Исследование фокусировки фононов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии показало, что направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки в кристаллах второго типа и наоборот. Проанализировано влияние фокусировки на угловое распределение плотности фононных состояний (ПФС). Показано, что в упруго анизотропных кристаллах максимальные значения ПФС достигаются в областях фокусировки, а минимальные - для областей дефокусировки фононов. Поэтому направления максимумов ПФС в кристаллах первого типа становятся направлениями минимумов в кристаллах второго типа. Рассмотрены особенности

распространения фононных импульсов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Получено точное аналитическое выражение для коэффициента усиления потока фононов и проанализированы особенности его поведения в зависимости от типа кривизны изоэнергетической поверхности.

Во второй главе дано аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах 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. Показано, 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. Аналитическое решение задачи о диффузном рассеянии фононов на границах и определение времен релаксации фононов позволило избавиться от подгоночных параметров при расчете теплопроводности объемных монокристаллов и наноструктурных образцов.

В третьей главе развит метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов. 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, обнаруженные в работе МакКарди. В интервале температур от 3 до 15 К, когда доминирует рассеяние на границах и изотопическом беспорядке, теория [20-22] количественно описывает температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния в пределах погрешности эксперимента для всех образцов и оба эффекта, обнаруженные в работе МакКарди [19], без использования подгоночных параметров.

В четвертой главе исследован фононный транспорт в наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии при низких температурах, когда доминирующим механизмом релаксации является диффузное рассеяние фононов на границах. Установлена корреляция между угловыми зависимостями плотностей фононных состояний

(ПФС) и длин свободного пробега квазипоперечных мод. Показано, что в упруго анизотропных кристаллах благодаря эффекту фокусировки возникают области направлений, в которых и длины свободного пробега и ПФС достигают максимальных значений. Рассмотрено влияние фокусировки фононов на зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров наноструктур, для различных направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок относительно осей кристалла. Определены ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов полупроводниковых микросхем.

В пятой главе рассмотрено влияние анизотропии упругой энергии на фононный транспорт в монокристаллических пленках в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Исследовано влияние фокусировки на распространение фононов и теплопроводность пленок с различным типом анизотропии упругой энергии. Проанализированы физические причины, приводящие к анизотропии теплопроводности для теплового потока в плоскостях пленок с различным типом анизотропии упругой энергии и различными соотношениями геометрических параметров. Показано, что анизотропия теплопроводности пленок существенным образом зависит от их ориентации.

В шестой главе рассчитаны 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. Показано, что как при низких, так и при комнатных температурах максимальной теплопроводностью обладают пленки Si с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью – пленки с ориентацией $\{111\}$. Исследование роли граничного рассеяния показало, что при комнатных температурах вклад граничного рассеяния в теплосопrotивление достигает 60% для нанопроводов с диаметром 56 нм и для пленок с толщиной 20 нм, соответственно.

Глава 1. РАСПРОСТРАНЕНИЕ УПРУГИХ ВОЛН И ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

В значительном числе публикаций, посвященных анализу теплопроводности, как в объёмных материалах [9,13,35,36], так и наноструктурах [5,6,7,25,37], 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. Эта модель не является адекватной для анализа фононного транспорта и поглощения ультразвука в упруго анизотропных кристаллах (см., например [19,27,38-40]). 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 [41-43], которые для большинства кристаллов экспериментально определены.

Анизотропия упругой энергии приводит к ряду новых эффектов в динамических характеристиках упругих волн и фононном транспорте кубических кристаллов. Во-первых, в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания, и только в симметричных направлениях, таких как [100], [110] и [111], распространяются чистые моды [27,40-43]. Во-вторых, спектр фононов становится анизотропным, и снимается вырождение поперечных колебательных мод. Детальный анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах проведен в работе [44] (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 два типа: на кристаллы с положительной (тип I) и отрицательной (тип II) анизотропией упругих мо-

дулей второго порядка [44]. Вид спектра колебательных ветвей для кристаллов этих типов различается 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 [16-18,45]. Фононы будут преимущественно распространяться в направлениях фокусировки: их плотность состояний может быть значительно больше, чем в модели изотропной среды. Тогда как 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 поведение векторов поляризации качественно отличаются, но и эффекты фокусировки фононов проявляются различным образом. Для кристаллов одного типа направления фокусировки и дефокусировки колебательных мод совпадают, тогда в кристаллах различного типа они противоположны: направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки в кристаллах второго типа. При низких температурах, когда длина пробега фононов превышает поперечный размер образца, это может приводить к качественному отличию анизотропии фононного транспорта в кубических кристаллах различного типа.

В разделе 1.1 рассчитаны динамические характеристики фононов в кубических кристаллах в модели анизотропного континуума. В разделе 1.2 развит метод, позволяющий аппроксимировать спектр фононов, найденный из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений, на всю зону Бриллюэна для кубических кристаллов. В разделе 1.3 проведен расчет теплоемкости кристаллов Si и Ge с использованием аппроксимационного спектра фононов. В разделе 1.4 проанализировано влияние фокусировки на групповые скорости и особенности распространения фононов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. В разделе 1.5 исследовано влияние анизотропии упругой энергии на плотность фононных состояний в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. В разделе 1.6 проанализирован коэффициент усиления потока фононов.

1.1. ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФОНОНОВ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ В МОДЕЛИ АНИЗОТРОПНОГО КОНТИНУУМА

В феноменологической теории упругости кристалл в недеформированном равновесном состоянии рассматривается как континуум с постоянной плотностью ρ . Под действием внешней силы в кристалле возникают деформации, и относительные положения частиц изменяются. В этом случае состояние кристалла описывается векторным полем смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = (u_1, u_2, u_3)$, которое задает смещение в момент времени t некоторой точки, имеющей в равновесии координату $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$. Такое описание применимо тогда, когда смещения соседних атомов в кристалле гораздо меньше расстояния между ними. В этом случае они могут быть представлены в виде непрерывно и медленно меняющимся полем смещений [41-43,46,47]. Для характеристики деформации континуума в каждой точке вводится симметричный тензор деформации η_{ik} ($i, j = 1, 2, 3$) [41-43]:

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

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

$$\eta_{ik} = \frac{1}{2} (\xi_{ik} + \xi_{ki}). \quad (1.2)$$

Силы в теории упругости (напряжения) являются поверхностными силами и должны описываться симметричным тензором напряжений σ_{ij} [41-43]. Симметрия σ_{ij} вытекает из требования, чтобы при равновесии моменты сил равны нулю. В случае малых напряжений соотношения между напряжениями и деформациями, согласно закону Гука, линейны и выражаются тензором четвертого ранга – тензором модулей упругости c_{ikmn} [41-43,46,47]:

$$\sigma_{ik} = \sum_{m,n} c_{ikmn} \varepsilon_{mn}. \quad (1.3)$$

Плотность упругой энергии U , отнесенная к единице объема недеформируемого кристалла, имеет вид [41-43,46,47]:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,k,m,n} \eta_{ik} c_{ikmn} \eta_{mn} \quad (1.4)$$

Тензор модулей упругости симметричен относительно перестановки индексов внутри первой или второй пары, а также относительно перестановки первой пары со второй:

$$c_{ikmn} = c_{kilm} = c_{iknm} = c_{mnik} \quad (1.5)$$

Первое свойство следует из симметрии тензоров деформации и напряжений, второе – из существования плотности энергии в виде (1.4). В большинстве случаев вместо тензора четвертого ранга c_{ikmn} используется более простой тензор второго ранга $c_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2, \dots, 6$), введенный Фойгтом [48] по схеме, представленной в таблице 1.1.

Таблица 1.1.

Определение упругих постоянных по Фойгту [48]
(связь между c_{ikmn} и $c_{\alpha\beta}$).

| | | | | | | |
|--------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $c_{ik, mn}$ | 11 | 22 | 33 | 23 | 13 | 12 |
| 11 | c_{11} | c_{12} | c_{13} | c_{14} | c_{15} | c_{16} |
| 22 | c_{21} | c_{22} | c_{23} | c_{24} | c_{25} | c_{26} |
| 33 | c_{31} | c_{32} | c_{33} | c_{34} | c_{35} | c_{36} |
| 23 | c_{41} | c_{42} | c_{43} | c_{44} | c_{45} | c_{46} |
| 13 | c_{51} | c_{52} | c_{53} | c_{54} | c_{55} | c_{56} |
| 12 | c_{61} | c_{62} | c_{63} | c_{64} | c_{65} | c_{66} |

Эту таблицу можно представить в более компактном виде [41]:

| | | | | | | |
|----------------------|----|----|----|----|----|----|
| ik или mn | 11 | 22 | 33 | 23 | 13 | 12 |
| α или β | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |

Матрица $c_{\alpha\beta}$, согласно (1.5), симметрична ($c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha}$) и содержит 21 независимую величину.

Рассмотрим переход к обозначениям Фойгта для простейших примеров изотропной среды и кубического кристалла. Изотропная среда обладает наивысшей степенью симметрии. Для неё тензор c_{iklm} инвари-

антен по отношению ко всем вращениям и отражениям в трехмерном пространстве. Этому условию удовлетворяет только единичный тензор (с точностью до скалярного множителя). Поэтому компоненты тензора c_{iklm} должны выражаться через комбинации компонент единичного тензора δ_{ij} с некоторыми коэффициентами. Нетрудно убедиться, что с учетом свойств симметрии тензор модулей упругости c_{iklm} для изотропной среды может быть представлен в следующем виде [42]:

$$c_{iklm} = c\delta_{ij}\delta_{lm} + a(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}). \quad (1.6)$$

Это выражение содержит только две независимые константы a и c , которые можно выразить через модули упругости c_{11} и c_{12} : $c = c_{12}$, $a = (c_{11} - c_{12})/2$. Воспользуемся таблицей 1.1. и найдем матрицу Фойгта $C_{\alpha\beta}$ для изотропной среды, соответствующую тензору (1.6):

$$c_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (c_{11} - c_{12})/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (c_{11} - c_{12})/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (c_{11} - c_{12})/2 \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Кубический кристалл характеризуется наличием трех взаимно перпендикулярных осей симметрии второго и четвертого порядков и оси симметрии третьего порядка, направленной вдоль пространственной диагонали куба [42]. При вращениях координатной системы величины c_{ikmn} преобразуются по правилам преобразования компонент тензора. Если D_{ik} есть ортогональная матрица, описывающая вращение координатной системы ($\mathbf{r}' = D\mathbf{r}$; $x'_i = \sum_l D_{il}x_l$), то в преобразованной системе

$$c'_{ikmn} = \sum_{i',k',m',n'} D_{ii'}D_{kk'}D_{mm'}D_{nn'}c_{i'k'm'n'} \quad (1.8)$$

Рассмотрим преобразования компонент тензора c_{ikmn} , при вращении относительно осей второго порядка. Из соотношений (1.8) следует, что инвариантность тензора модулей упругости относительно таких вращений приводит к тому, что отличными от нуля остаются лишь ком-

поненты тензора модулей упругости c_{ikmn} , в которых каждый индекс входит четное число раз [42]. Воспользуемся условиями (1.5) и таблицей 1.1, получим тензор упругих модулей $c_{\alpha\beta}$ в обозначениях Фойгта, который будет инвариантным относительно поворотов на 180° вокруг осей X,Y,Z:

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Инвариантность тензора модулей упругости относительно вращений вокруг осей третьего порядка приводит к равноправию всех трех координат x, y, z , которые переходят одна в другую при поворотах вокруг пространственной диагонали куба. Поэтому элементы матрицы c_{ikmn} не должны меняться при любых перестановках индексов 1, 2, 3. Отсюда следует [42]

$$c_{1111} = c_{2222} = c_{3333}, \quad c_{1122} = c_{2233} = c_{3311}, \quad c_{2323} = c_{3131} = c_{1212}. \quad (1.10)$$

Или в обозначениях Фойгта

$$c_{11} = c_{22} = c_{33}, \quad c_{12} = c_{13} = c_{23}, \quad c_{44} = c_{55} = c_{66}. \quad (1.11)$$

В итоге получаем тензор модулей упругости $c_{\alpha\beta}$ в виде [41-43,46,47]

$$c_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

Такой же вид тензора $c_{\alpha\beta}$ можно получить, используя инвариантность тензора модулей упругости c_{ikmn} относительно вращений вокруг

осей четвертого порядка X,Y,Z. Таким образом, упругие свойства кубических кристаллов определяются тремя модулями упругости: c_{11} , c_{12} и c_{44} .

Использование выражений (1.4), (1.12) и таблицы 1.1, позволяет получить плотность упругой энергии кубических кристаллов через компоненты тензора деформации в виде:

$$U = \frac{1}{2}c_{11}(\eta_{11}^2 + \eta_{22}^2 + \eta_{33}^2) + c_{12}(\eta_{11}\eta_{22} + \eta_{22}\eta_{33} + \eta_{33}\eta_{11}) + 2c_{44}(\eta_{12}^2 + \eta_{23}^2 + \eta_{13}^2). \quad (1.13)$$

Как и следовало ожидать, в модели анизотропного континуума упругая энергия кубического кристалла определяется тремя модулями второго порядка c_{11} , c_{12} и c_{44} . В гармоническом приближении можно ограничиться линейным приближением (1.2) в выражении для компонент тензора деформации через компоненты тензора дисторсии ξ_{ij} . Тогда для плотности упругой энергии (1.13), получим:

$$U = \frac{1}{2}c_{11}(\xi_{11}^2 + \xi_{22}^2 + \xi_{33}^2) + c_{12}(\xi_{11}\xi_{22} + \xi_{22}\xi_{33} + \xi_{33}\xi_{11}) + \frac{1}{2}c_{44}(\xi_{12}^2 + \xi_{23}^2 + \xi_{13}^2). \quad (1.14)$$

Для перехода к модели изотропной среды преобразуем плотность упругой энергии (1.14) к виду

$$U = \frac{1}{2}c_{12}\left(\sum_i \xi_{ii}\right)^2 + \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})\sum_i \xi_{ii}^2 + \frac{1}{4}c_{44}\sum_{i,k} (\xi_{ik} + \xi_{ki})^2. \quad (1.15)$$

Равенство

$$c_{11} - c_{12} - 2c_{44} = 0 \quad (1.16)$$

обеспечивает переход к модели изотропной среды. Очевидно, что в этом случае плотность упругой энергии $U(\xi_{in})$ определяется двумя модулями упругости второго порядка.

Для вывода уравнений движения теории упругости воспользуемся вариационным принципом. Для этого запишем плотность лагранжиана [41]:

$$L(\dot{u}_i, \xi_{in}) = T(\dot{u}_i) - U(\xi_{in}), \quad T(\dot{u}_i) = \sum_i \frac{\rho}{2} \dot{u}_i^2, \quad (1.17)$$

где $T(\dot{u}_i)$ - плотность кинетической энергии, а плотность упругой энергии $U(\xi_{in})$ определена выражением (1.14) или (1.15). Согласно вариационному принципу, интеграл $\int L(\dot{u}_i, \xi_{in}) dr dt$ должен иметь экс-

тремум при вариациях, исчезающих на границах интегрирования. Тогда получаем уравнение Эйлера для этой задачи [41]:

$$-\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L(\dot{u}_i, \xi_{in})}{\partial \dot{u}_i} - \sum_n \frac{\partial}{\partial x_n} \frac{\partial L(\dot{u}_i, \xi_{in})}{\partial \xi_{in}} = 0. \quad (1.18)$$

Подстановка выражений (1.16) и (1.14) в уравнение (1.17) дает систему уравнений движения для компонент вектора смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ в виде [42,43,47]:

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_1 &= c_{11} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \right) + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} \right), \\ \rho \ddot{u}_2 &= c_{11} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2 \partial x_3} \right) + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2} \right), \\ \rho \ddot{u}_3 &= c_{11} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_3} \right) + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2} \right). \end{aligned} \quad (1.19)$$

Использование выражения (1.15) позволяет представить систему уравнений (1.18) в более компактном виде [43]

$$\rho \ddot{u}_i = (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} + (c_{12} + c_{44}) \nabla_i (\nabla \cdot \mathbf{u}) + c_{44} \Delta u_i, \quad (1.20)$$

где ∇ – оператор градиента, а Δ – оператор Лапласа. При $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} = 0$ первый член в выражении (1.19) обращается в нуль, тогда для упруго изотропной среды получаем известный результат [43,46]

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = (c_{11} - c_{44}) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + c_{44} \Delta \mathbf{u}. \quad (1.21)$$

Это уравнение обладает одним важным свойством: оно инвариантно относительно поворота осей, так как каждый член уравнения представляет собой инвариант. Таким образом, соотношение (1.16) представляет собой условие того, что кристалл является упругоизотропным. В таком кристалле фазовые скорости изотропны и совпадают с групповыми скоростями, поперечные моды вырождены, а скорости продольных не совпадают со скоростями поперечных волн [43,46].

В монографии [43] фактор анизотропии кубических кристаллов определен следующим соотношением

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}. \quad (1.22)$$

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

Решения системы уравнений (1.19) представим в виде плоских монохроматических волн, для которых вектор смещения можно записать в виде:

$$\mathbf{u} = A\mathbf{e}(\mathbf{q}) \exp[i(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r})], \quad (1.23)$$

где $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ - волновой вектор, $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ - вектор поляризации; он указывает направление, в котором колеблются частицы вещества. Если вектор $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ параллелен волновому вектору \mathbf{q} , то волна называется *продольной*. Если вектор $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ перпендикулярен волновому вектору \mathbf{q} , то волна называется *поперечной*. Как мы увидим далее, в кубических кристаллах из-за анизотропии упругой энергии упругие волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными. Для того чтобы плоская волна, определяемая выражением (1.23), могла быть решением уравнений движения (1.19), должно существовать определенное соотношение между частотой ω и волновым числом q , которое называется дисперсионным соотношением. В упруго анизотропной сплошной среде (модели анизотропного континуума) предполагается, что волновой вектор фонона \mathbf{q} гораздо меньше дебаевского волнового вектора q_D , и спектр фононов с поляризациями l может быть представлен в виде

$$\omega_q^\lambda = S_0^\lambda(\theta, \varphi)q. \quad (1.24)$$

Подстановка решения в виде плоской волны (1.23) в уравнения движения (1.19) дает систему уравнений Кристофеля [42,47] для определения векторов поляризаций $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ и спектра фононов в кубических кристаллах. В системе координат по ребрам куба, она может быть представлена в виде [44]:

$$\sum_j e_j \{ (n_i n_j - \varepsilon \delta_{ij}) + (k-1)n_i n_j (1 - \delta_{ij}) \} = 0, \quad \varepsilon = \frac{S_0(\theta, \varphi)^2 \rho - c_{44}}{c_{11} - c_{44}}. \quad (1.25)$$

Здесь $n_j = q_j/q$ – проекции единичного вектора фонона $\mathbf{n} = (\sin\theta\cos j, \sin\theta\sin j, \cos\theta)$ на соответствующие оси координат, δ_{ij} – символ Кронекера. Как видно из уравнений (1.25), безразмерный параметр $k-1$ является единственным безразмерным параметром, который характеризует влияние упругой анизотропии на динамические характеристики упругих волн в кубических кристаллах:

$$k-1 = \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{11} - c_{44}} - 1 = \frac{c_{12} + 2c_{44} - c_{11}}{c_{11} - c_{44}} \quad (1.26)$$

Из условия существования нетривиального решения системы однородных уравнений (1.25) находим кубическое уравнение для спектра фононов:

$$\varepsilon^3 - \varepsilon^2 - (k^2 - 1)\varepsilon\xi - (1 - k)^2(2k + 1)\eta = 0, \quad (1.27)$$

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. Уравнение (1.27) имеет три решения, которые соответствуют трем акустическим модам: продольной (L) и двум поперечных (t_1, t_2):

$$S_0^\lambda(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon^\lambda \right)^{1/2}, \quad \varepsilon^\lambda = \frac{1}{3} + z^\lambda.$$

$$z^L = \frac{2}{3} r \cos \frac{Q}{3}, \quad z^{t_1, t_2} = \frac{2}{3} r \cos \left(\frac{Q}{3} \mp \frac{2\pi}{3} \right), \quad (1.28)$$

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

Индексы поляризации фононов t_1 и t_2 соответствуют «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным колебательным модам. Далее будет показано, что при классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию, а разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды в ряде случаев является физически некорректным.

Подстановка решений (1.28) в систему уравнений (1.25) позволяет определить вектора поляризаций фононов различных колебательных ветвей [44]:

$$e_j^\lambda = \frac{1}{A^\lambda} \left\{ \frac{n_j}{\psi_j^\lambda} \right\}, \quad A^\lambda = \pm \sqrt{\sum_j \frac{n_j^2}{(\psi_j^\lambda)^2}}, \quad (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}) = \frac{1}{A^\lambda} \sum_j \frac{n_j^2}{\psi_j^\lambda}, \quad \psi_j^\lambda = \varepsilon^\lambda + (k-1)n_j^2. \quad (1.29)$$

Нетрудно убедиться, что для векторов поляризаций выполняются соотношения:

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

Отметим, что, хотя формулы (1.29) просты, однако использование их при расчетах частот релаксации фононов затруднено из-за возникающих при этом неопределенностей типа 0/0 для определенных симметричных направлений (см. ниже). Для определения величин e_j в этих направлениях приходится возвращаться к исходной системе (1.25).

Для изотропной среды параметр $k-1 = 0$. Анизотропия спектра исчезает, а уравнение (1.27) сводится к виду

$$\mathcal{E}^2(\mathcal{E} - 1) = 0. \quad (1.30)$$

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 $S^{t1} = S^{t2} = \sqrt{c_{44}/\rho}$. 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, 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.

Для каждого направления волнового вектора в кристалле существуют три независимые волны со своими фазовыми скоростями $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$ 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 [42,47]. 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 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 [38,49].

Важную роль в анизотропии спектра и угловых зависимостей векторов поляризации фононов играет абсолютная величина и знак параметра

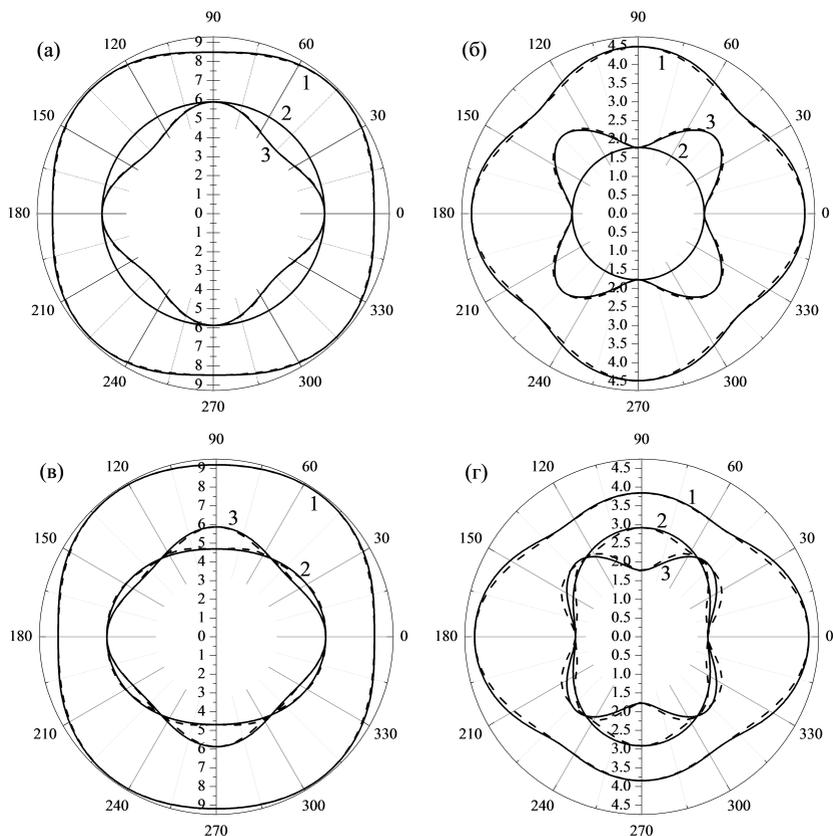


Рис. 1.1. Угловые зависимости скоростей звука $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$ (10^5 см/с), в кристаллах Si (а, в) и KCl (б, г) для волнового вектора, лежащего в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (а, б) и в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) (в, г). Кривые 1 – для квазипродольных волн, кривые 2 и 3 – для квазипоперечных мод t_1 и t_2 , соответственно. Штриховые кривые – аппроксимация (1.32)

$k-1 = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11}) / (c_{11} - c_{44})$. В соответствии со знаком величины $k-1$ все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной $k-1 > 0$ и отрицательной $k-1 < 0$ анизотропией упругих модулей второго поряд-

ка (см. таблицу 1.2). К первому типу относятся кристаллы Ge, Si, алмаза, GaSb и т.д. (см. таблицу 1.2). Для них в направлениях [100] скорость продольных фононов – минимальна, а поперечных фононов – максимальна, тогда как в направлениях [111] скорость продольных фононов – максимальна, а поперечных фононов – минимальна в направлениях [110] (см. рис. 1.1 а, в):

$$S_{[100]}^L = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}, \quad S_{[111]}^L = S_{[100]}^L \left(1 + \frac{2\Delta C}{3c_{11}}\right)^{1/2}, \quad S_{[110]}^L = S_{[100]}^L \left(1 + \frac{\Delta C}{2c_{11}}\right)^{1/2}, \quad \Delta C = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11}),$$

$$S_{[100]}^T = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}, \quad S_{[111]}^T = S_{[100]}^T \left(1 - \frac{\Delta C}{3c_{44}}\right)^{1/2}, \quad S_{[110]}^T = S_{[100]}^T, \quad S_{[110]}^{\prime 2} = S_{[100]}^{\prime 2} \left(1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}}\right)^{1/2}. \quad (1.31)$$

Таблица 1.2

Упругие модули второго порядка c_{ij} (10^{12} дин/см²) и классификация кубических кристаллов в соответствии с параметром анизотропии $k-1$ (плотность ρ (г/см³)). Данные взяты из работ [46, 50-59].

| Тип | Кристалл | c_{11} | c_{12} | c_{44} | ρ | $k-1$ | Степень ионности связи |
|-----|------------------|----------|----------|----------|--------|--------|------------------------|
| I | Ge | 1.289 | 0.483 | 0.671 | 5.32 | 0.87 | 0 |
| | Si | 1.677 | 0.65 | 0.804 | 2.3301 | 0.67 | 0 |
| | Алмаз | 10.76 | 1.25 | 5.76 | 3.512 | 0.40 | 0 |
| | GaAs | 1.1904 | 0.5384 | 0.5952 | 5.317 | 0.90 | 0.12 |
| | HgSe | 0.69 | 0.51 | 0.23 | 8.26 | 0.61 | 0.15 |
| | GaN | 2.93 | 1.59 | 1.55 | 6.15 | 1.275 | 0.43 |
| | GaSb | 0.885 | 0.404 | 0.433 | 5.62 | 0.85 | 0.26 |
| | InSb | 0.672 | 0.367 | 0.302 | 5.76 | 0.81 | 0.32 |
| | LiF | 1.246 | 0.424 | 0.649 | 2.646 | 0.78 | 0.92 |
| | MgO | 3.0617 | 0.9378 | 1.5758 | 3.58 | 0.69 | 0.84 |
| | YAG | 3.281 | 1.064 | 1.137 | 4.55 | 0.03 | |
| | Na | 0.0615 | 0.0469 | 0.0592 | 1.01 | 45.13 | Металл |
| | Li | 0.148 | 0.125 | 0.108 | 0.55 | 4.825 | >> |
| | K | 0.0457 | 0.0374 | 0.0263 | 0.91 | 2.284 | >> |
| | Cu | 1.684 | 1.214 | 0.754 | 8.94 | 1.116 | >> |
| | Ag | 1.22 | 0.915 | 0.448 | 10.49 | 0.766 | >> |
| | Pb | 0.466 | 0.392 | 0.144 | 11.34 | 0.655 | >> |
| Ni | 2.465 | 0.473 | 1.247 | 8.9 | 0.412 | >> | |
| Au | 1.86 | 1.57 | 0.42 | 19.32 | 0.382 | >> | |
| Al | 1.069 | 0.626 | 0.285 | 2.7 | 0.162 | >> | |
| II | KCl | 0.398 | 0.062 | 0.0625 | 1.98 | -0.63 | 0.95 |
| | NaCl | 0.575 | 0.099 | 0.133 | 2.214 | -0.48 | 0.94 |
| | PbS | 1.27 | 0.298 | 0.248 | 7.5 | -0.466 | 0.20 |
| | CaF ₂ | 1.74 | 0.56 | 0.359 | 3.211 | -0.33 | 0.89 |
| | SrF ₂ | 1.24 | 0.43 | 0.31 | 2.44 | -0.204 | 0.89 |
| | YIG | 2.69 | 1.077 | 0.764 | 5.17 | -0.04 | |
| | Mo | 4.6 | 1.76 | 1.1 | 10.19 | -0.183 | Металл |
| | W | 5.01 | 1.98 | 1.514 | 19.2 | -0.001 | Металл |

Ко второму типу кубических кристаллов ($k-1 < 0$) относятся кристаллы KCl, NaCl, и т.д. (см. таблицу 1.2). 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. 1.1б, г). Хотя Ge, Si и алмаз, входящие в первую группу кубических кристаллов, являются ковалентными, а KCl, NaCl и CaF₂ являются ионными кристаллами, проведенное нами разделение кубических кристаллов по их упругим свойствам на два типа не связано с характером их химической связи. Следует отметить, что в первую группу попали полупроводниковые кристаллы GaSb и InSb, а также ионные соединения LiF и MgO. Отметим, что металлы кубической симметрии также попали как в первую, так и во вторую группу. По-видимому, нет другого физического критерия, позволяющего разделить кубические кристаллы на два типа, кроме, как из анализа уравнений Кристоффеля, приведенного выше (см. также [44]).

Отклонение скоростей звука в кубических кристаллах, таких как Ge, от упругоизотропных сред относительно невелико – оно не превышает 23%. Это позволяет учитывать анизотропию спектра по теории возмущений. Для упрощения аналитических расчетов частот релаксации фононов с учетом кубической анизотропии выражения для скоростей звука (1.28) с хорошей точностью могут быть аппроксимированы в линейном приближении по кубическим гармоникам $\xi(\theta, \varphi)$ и $\eta(\theta, \varphi)$ следующим образом:

$$S_0^\lambda(\theta, \varphi) = S_{[100]}^\lambda \left\{ 1 + a_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + a_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) \right\}. \quad (1.32)$$

Коэффициенты a_1^λ и a_2^λ находятся из условия, что во всех кристаллографических направлениях типа [100], [110] и [111] выражения (1.32) совпадают с точным решением:

$$\begin{aligned}
 a_1^L &= 4 \left[\sqrt{1 + \frac{\Delta C}{2c_{11}}} - 1 \right], & a_2^L &= 27 \left[\sqrt{1 + \frac{2\Delta C}{3c_{11}}} + \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \sqrt{1 + \frac{\Delta C}{2c_{11}}} \right], \\
 a_1^{t1} &= 0, & a_2^{t1} &= 27 \left[\sqrt{1 - \frac{\Delta C}{3c_{44}}} - 1 \right], \\
 a_1^{t2} &= 4 \left[\sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}}} - 1 \right], & a_2^{t2} &= 27 \left[\sqrt{1 - \frac{\Delta C}{3c_{44}}} + \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}}} \right].
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

Проведенный анализ показал, что аппроксимация, определяемая формулами (1.32) и (1.33) (см. рис. 1.1, штриховые линии), хорошо воспроизводит все особенности колебательных ветвей фононов в кубических кристаллах для произвольного направления. Погрешность аппроксимации для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба, составляет примерно 1% для Si и 2% для KCl, тогда как для диагонального сечения максимальная погрешность увеличивается до 3% для Si и 7% для KCl.

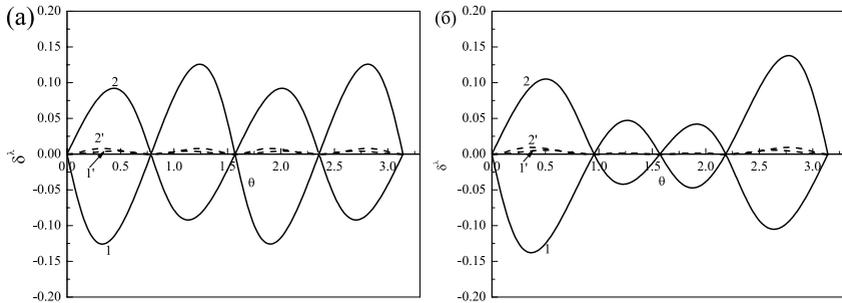


Рис. 1.2. Угловые зависимости величин δ^L и δ^{t2} , характеризующих отклонения векторов поляризации от чистых мод, для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). 1, 1' – для кристаллов Si, 2, 2' – для NaCl. 1, 2 – для квазипоперечных мод и 1', 2' – для квазипродольных мод

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 $(\mathbf{e}^t \mathbf{n}) = 1 - \delta^L$ мало отличается от единицы, при этом параметр $\delta^L < 0.02$ 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. В литературе этот вопрос относится к слабо изученным.

Поэтому далее мы 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, величина $\mathbf{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, функции $\xi = n_1^2 n_2^2 = \sin^2 \theta \cos^2 \theta$, $\eta = 0$, а кубическое уравнение сводится к виду:

$$\varepsilon(\varepsilon^2 - \varepsilon - (k^2 - 1)\xi) = 0. \quad (1.34)$$

Его решение для продольных и поперечных мод имеет вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{t1} &= 0, & \varepsilon^{L,t2} &= 1/2 \pm \sqrt{1/4 + (k^2 - 1)\xi}, \\ S_0^{t1} &= S_{[100]}^t, & S_0^{L,t2} &= S_{[100]}^t \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon^{L,t2}}. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Подстановка этих решений в (1.25) (или использование формул (1.29)) дает выражение для векторов поляризации:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^{t1}(\theta) &= \{0, 1, 0\}, & (\mathbf{e}^{t1} \mathbf{n}_1) &= 0, & e_x^{t2} &= \frac{n_x \psi_z \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2}, \\ e_y^{t2} &= 0, & \psi_{x,z} &= \varepsilon^{t2} + (k-1)n_{x,z}^2, \\ e_z^{t2} &= \frac{n_z \psi_x \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} = -\sqrt{1 - (e_x^{t2})^2}, & \psi_2 &= \sqrt{\varepsilon^{t2}(1 + 4(k-1)\xi) + 2k(k-1)\xi}, \\ (\mathbf{e}^{t2} \mathbf{n}) &= \delta^{t2} = \frac{\text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} (\varepsilon^{t2} + 2(k-1)\xi) = \cos(\theta_e - \theta), \end{aligned} \quad (1.36)$$

где θ_e – угол между вектором поляризации \mathbf{e}^{i2} и осью Z . Итак, мода ε^{i1} является чисто поперечной с вектором поляризации, направленным перпендикулярно рассматриваемой плоскости XZ . 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^{i2} 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 второго типа (KCl, NaCl) она является быстрой поперечной модой (см. рис. 1.1). Величина δ^{i2} характеризует отклонение вектора поляризации \mathbf{e}^{i2} от чистой моды. Максимальные значения продольных компонент этой моды δ^{i2} 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 Si, алмазу и кристаллам YAG, поэтому максимальные значения δ^{i2} уменьшаются до 12.6% для кристаллов Si, 8.4% для алмаза, 9.1% для NaCl и исчезающе малых значений для YAG и YIG.

Из рисунка 1.3а видно, что значения x -компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{i2} квазипоперечных мод в кристаллах Si и NaCl (кривые 1 и 2) и соответствующих им компонент чистой моды $\mathbf{e}_0^{i2} = (\cos \theta, 0, -\sin \theta)$, для которой величина $(\mathbf{e}_0^{i2}, \mathbf{n}) = 0$ для обоих видов кристаллов, отличаются более значительно, чем величины δ^{i2} . Как видно из рисунков 1.2 и 1.3, для кристаллов I типа (Ge, Si) в области углов $0 < \theta_e < \pi/4$ угол θ_e между волновым вектором и вектором поляризации \mathbf{e}^{i2} превосходит значение $\pi/2$, и величина $\delta^{i2} < 0$, а для области углов $\pi/4 < \theta_e < \pi/2$ угол θ_e меньше $\pi/2$, и величина $\delta^{i2} > 0$. Для кристаллов II типа (KCl, NaCl) ситуация обратная (см. рис. 1.2 и 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 (1.27) может быть факторизовано для функции $\psi_x = \varepsilon + (k-1)n_x^2$:

$$\psi_x [\psi_x^2 - \psi_x (1 + 3(k-1)n_x^2) + 2k(k-1)n_x^2(3n_x^2 - 1)] = 0. \quad (1.37)$$

Одно из решений этого уравнения $\psi_x^{i1} = 0$ дает:

$$\varepsilon^{r1} = -\frac{1}{2}(k-1)\sin^2 \theta, \quad S_0^{r1}(\theta, \frac{\pi}{4}) = S_{[100]}^r \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}} \sin^2 \theta}. \quad (1.38)$$

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

$$\mathbf{e}^{r1} = (-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0), \quad (\mathbf{e}^{r1}, \mathbf{n}) = 0. \quad (1.39)$$

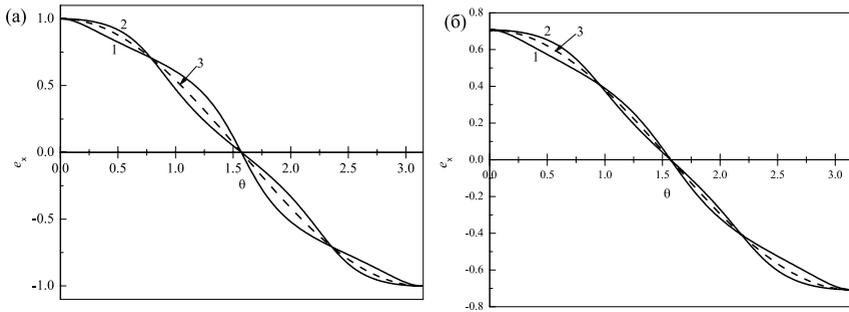


Рис. 1.3. Угловые зависимости x-компоненты векторов поляризации \mathbf{e}^2 квазипоперечных мод в кристаллах Si (кривые 1) и NaCl (кривые 2) для волновых векторов в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). Штриховые линии 3 – для соответствующих компонент чистых мод

Таким образом, эта мода является чисто поперечной, несмотря на то, что спектр фононов для нее является анизотропным (см. рис. 1.1 в,г). 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 [42] 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 кристал-

ла, поэтому полученный выше результат согласуется с анализом, проведенным в [42]. Отметим, что мода ε^{t1} является быстрой для кубических кристаллов I типа (и медленной для кристаллов II типа) в области углов $-\theta_{[111]} < \theta < \theta_{[111]}$ и $\pi - \theta_{[111]} < \theta < \pi + \theta_{[111]}$ ($\theta_{[111]}$ – 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 уравнений (1.37) соответствуют продольной и второй поперечной моде:

$$\begin{aligned} \psi_x^{L,t2} &= 1/2(1 + 3(k-1)n_x^2) \pm \sqrt{1/4(1 + 3(k-1)n_x^2)^2 - 2k(k-1)n_x^2(3n_x^2 - 1)}, \\ S_0^{L,t2} &= S_{[100]}^t \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon^{L,t2}}, \quad \varepsilon^{L,t2} = \psi_x^{L,t2} - (k-1)n_x^2. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Мода ε^{t2} в общем случае является смешанной поперечно-продольной модой. Отметим, что мода ε^{t2} 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 вектора поляризации. Вектор поляризации для моды ε^{t2} лежит в диагональной плоскости и имеет вид:

$$\begin{aligned} e_x^{t2} &= e_y^{t2} = \frac{n_x \psi_z \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2}, \quad e_z^{t2} = \frac{n_z \psi_x \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} = -\sqrt{1 - 2(e_x^{t2})^2}, \\ \psi_x &= \psi_y = \varepsilon^{t2} + (k-1)n_x^2, \quad \psi_z = \varepsilon^{t2} + (k-1)n_z^2, \quad \psi_2 = \sqrt{2n_x^2 \psi_z^2 + n_z^2 \psi_x^2}, \end{aligned} \quad (1.41)$$

$$(e^{t2} \mathbf{n}) = \delta^{t2} = \frac{(2n_x^2 \psi_z + n_z^2 \psi_x)}{\psi_2} \text{sign}(n_z \psi_z) = \cos(\theta_e - \theta).$$

Максимальное значение продольной компоненты этой моды δ^{t2} составляет 16.5% для кристаллов Ge и достигает 27% для кристалла

KCl (см. рис. 1.2). Поскольку анизотропия упругих свойств кубических кристаллов убывает при переходе от кристаллов Ge к кристаллам Si, алмаза и YAG, то максимальные значения δ'^2 уменьшаются до 13.8% для кристаллов Si, 9.3% для алмаза, 10.4% для NaCl и 0.6% для YAG.

Из рисунка 1.3б видно, что величины x -компонент векторов поляризации \mathbf{e}'^2 квазипоперечных мод в кристаллах Ge и NaCl (кривые 1 и 2), и соответствующих им компонент для чистой моды $\mathbf{e}_0'^2 = (\cos \theta / \sqrt{2}, \cos \theta / \sqrt{2}, -\sin \theta)$, для которой величина $(\mathbf{e}_0'^2 \mathbf{n}) = 0$ для обоих видов кристаллов, отличаются более значительно, чем величины δ'^2 . Из выражений (1.41) следует, что z -компоненты векторов поляризации \mathbf{e}'^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'^2 превосходит $\pi/2$, и величина $\delta'^2 < 0$, а для области углов $\pi/4 < \theta < \pi/2$ угол θ'^2 меньше $\pi/2$, и величина $\delta'^2 > 0$. Для кристаллов II типа (KCl, NaCl) ситуация со знаками величины δ'^2 обратная (см. рис. 1.2 и 1.3, кривые 2). Итак, поведение векторов поляризации в кристаллах I и II типа существенно различается.

Проведенный анализ показал, что для волновых векторов, лежащих в плоскостях с углом $\varphi \neq 0, \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$, обе квазипоперечные моды являются смешанными поперечно-продольными модами с точкой вырождения в направлении [001]. Они могут быть классифицированы как «быстрые» и «медленные» моды, поскольку $S'^1(\theta, \varphi) \geq S'^2(\theta, \varphi)$. Их вектора поляризации \mathbf{e}'^1 и \mathbf{e}'^2 в значительной степени отличаются от векторов поляризации чистых мод $\mathbf{e}_0'^1 = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$ (перпендикулярного плоскости $\varphi = \text{const}$) и вектора $\mathbf{e}_0'^2 = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta)$ (лежащего в плоскости $\varphi = \text{const}$). Как видно из рисунка 1.4, вектор поляризации быстрой квазипоперечной моды \mathbf{e}'^1 при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0'^1$, т.е. к направлению, перпендикулярному плоскости $\varphi = \text{const}$, а при увеличении угла θ он отклоняется от вектора $\mathbf{e}_0'^1$ и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0'^2$, т.е. переходит в плоскость $\varphi = \text{const}$ (см. рис. 1.4а). С другой стороны, вектор поляризации медленной моды \mathbf{e}'^2 при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0'^2$, лежащему в плоскости $\varphi = \text{const}$, а при увеличении угла θ он выходит из этой плоскости и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0'^1$, т.е. к направлению, перпендикулярному плоскости $\varphi = \text{const}$.

Чем ближе угол φ к значению $\pi/4$, тем более резко изменяются угловые зависимости компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{t1} и \mathbf{e}^{t2} в окрестности угла $\theta = \theta_{[111]}$ (см. рис. 1.4а). Максимальные значения продольных компонент квазипоперечных мод δ^{t1} и δ^{t2} не превышают 17% для кристаллов Ge и 27% для KCl. Однако величины и угловые зависимости компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{t1} и \mathbf{e}^{t2} квазипоперечных мод и соответствующих им чистых мод \mathbf{e}_0^{t1} и \mathbf{e}_0^{t2} отличаются более значительно. Заметим, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в этом случае также мал, и им можно пренебречь.

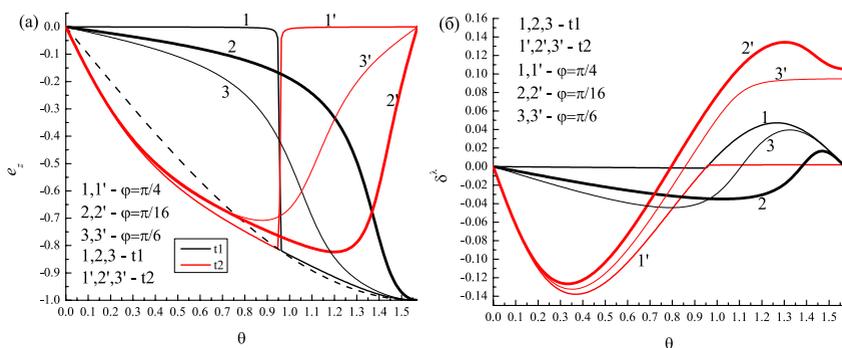


Рис. 1.4. Угловые зависимости z-компоненты векторов поляризации \mathbf{e}^{t1} и \mathbf{e}^{t2} (а) и величин δ^{t1} и δ^{t2} (б) для квазипоперечных мод в кристаллах Si. 1-3 – для быстрой моды (ε^{t1}), 1'-3' – для медленной моды (ε^{t2}). 1, 1' – для угла $\varphi = \pi/4$; 2, 2' – для угла $\varphi = \pi/16$; 3, 3' – для угла $\varphi = \pi/6$. Штриховые линии – для чистых поперечных мод

Можно отметить одно интересное следствие полученных результатов. Поскольку электрон-фононное взаимодействие через потенциал деформации в металлах и полупроводниках пропорционально скалярному произведению ($\mathbf{e}^2 \mathbf{q}$), то из-за наличия продольной компоненты в квазипоперечных колебаниях электроны могут «релаксировать» свой импульс на этих колебаниях. С другой стороны, квазипоперечные моды могут передавать свой импульс электронам и усиливать эффект электрон-фононного увлечения в таких полупроводниковых кристаллах как Ge, Si, GaSb, HgSe и InSb.

Итак, основные результаты анализа динамических характеристик фононов в кубических кристаллах в модели анизотропного континуума могут быть сформулированы следующим образом [44]:

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 отличаются.

2) Вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания для кубических кристаллов и первого и второго типа мал, и им можно пренебречь.

3) При классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию, а принятое в работах [46,47] разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды в ряде случаев не является физически корректным.

4) 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 квазипоперечных мод продольная компонента не является малой и должна учитываться при анализе поглощения ультразвука и фононного транспорта в кубических кристаллах.

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 [60-62]. 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 [60,61], проведём аппроксимацию фононного спектра для кристаллов Si и Ge на всю зону Бриллюэна. Для этого представим его в виде [39,63]

$$\omega_q^\lambda = S_0^\lambda(\theta, \varphi) q \{1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)\} \\ f^\lambda(x, \theta, \varphi) = A^\lambda(\theta, \varphi) x^2 - B^\lambda(\theta, \varphi) x^4 + C^\lambda(\theta, \varphi) x^6 - \dots \quad (1.42)$$

Здесь функция $f^\lambda(x, \theta, \varphi)$ описывает дисперсию тепловых фононов, коэффициенты $A^\lambda(\theta, \varphi)$, $B^\lambda(\theta, \varphi)$ и $C^\lambda(\theta, \varphi)$ 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 в гранецентрированной кубической решетке (ГЦК) он имеет вид

$$q_{\max}^{[001]} = 2\pi/a, \quad q_{\max}^{[101]} = (2\pi/a)(3\sqrt{2}/4), \quad q_{\max}^{[111]} = (2\pi/a)(\sqrt{3}/2), \quad (1.43)$$

где a – постоянная решетки (для кремния $a=5.431$ Å, для германия $a=5.66$ Å). Величина $q_{\max}(\theta, \varphi)$ может быть определена следующими соотношениями

$$q_1(\theta, \varphi) = \frac{q_{\max}^{[001]}}{|n_1|}, \quad q_2(\theta, \varphi) = \frac{q_{\max}^{[101]}}{|n_2|}, \quad q_3(\theta, \varphi) = \frac{q_{\max}^{[111]}}{|n_3|}, \quad q_4(\theta, \varphi) = \frac{3/2 q_{\max}^{[001]}}{|n_1| + |n_2| + |n_3|},$$

$$q_{\max}(\theta, \varphi) = \min\{q_1(\theta, \varphi), q_2(\theta, \varphi), q_3(\theta, \varphi), q_4(\theta, \varphi)\}. \quad (1.44)$$

где n_1, n_2, n_3 – компоненты вектора \mathbf{n} . В длинноволновом пределе $x \ll 1$ можно положить $f^\lambda(x, \theta, \varphi) = 0$. Тогда аппроксимация (1.42) переходит в модель анизотропного континуума (1.28), 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 углы $\theta = \theta_{[l]}$ и $\varphi = \varphi_{[l]}$, соответствующие симметричным направлениям, где $[l] = [100], [110]$ или $[111]$, затем воспользуемся разложением экспериментального спектра по степеням приведенного волнового вектора x и найдем коэффициенты $A_{[l]}^\lambda, B_{[l]}^\lambda, C_{[l]}^\lambda$ для каждой акустической моды. Значения этих коэффициентов приведены в таблице 1.3. Как видно из рисунка 1.5, аппроксимация спектра фононов в кристаллах в Si и Ge 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 1.3, 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 и Ge значительно меньше, чем для поперечных. Для поперечных мод 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 [60,61].

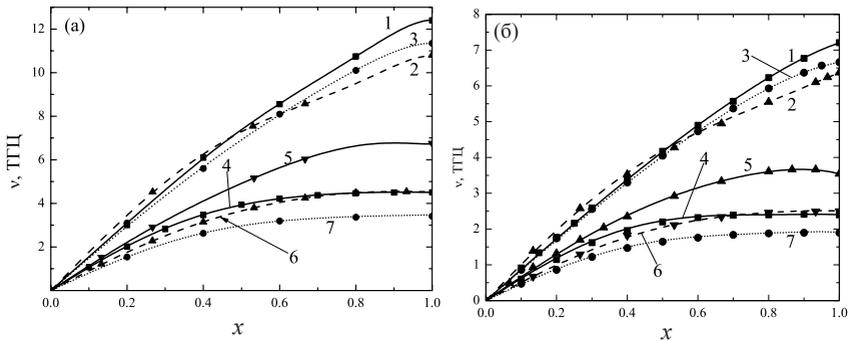


Рис. 1.5. Зависимости спектра $v^2 = \omega^2/2\pi$ в Si (а) и Ge (б) для продольных (кривые 1, 2, 3) и поперечных (кривые 4, 5, 6, 7) фононов от приведенного волнового вектора $x=q/q_{\max}$ при аппроксимации экспериментальных данных [60,61], обозначенных символами, полиномом седьмой степени для симметричных направлений: $[100]$ – кривые 1 и 4, $[110]$ – кривые 2, 5 и 6 (5-быстрая поперечная мода, 6-медленная), $[111]$ – кривые 3 и 7

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 [39,44]. Согласно [44], 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. [44], рис. 2). Аналогично [39,44] 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 $\eta(\theta, \varphi)$:

$$\begin{aligned}
A^\lambda(\theta, \varphi) &= A_{[100]}^\lambda \left\{ 1 + a_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + a_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) \right\}, \\
B^\lambda(\theta, \varphi) &= B_{[100]}^\lambda \left\{ 1 + b_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + b_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) \right\}, \\
C^\lambda(\theta, \varphi) &= C_{[100]}^\lambda \left\{ 1 + c_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + c_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) \right\}.
\end{aligned} \tag{1.45}$$

Учитывая, что для симметричных направлений типа [001] $\xi(0,0) = \eta(0,0) = 0$, для направлений [101] $\xi(\pi/4,0) = 0.25$, $\eta(\pi/4,0) = 0$, для направлений [111] $\xi(\theta_{[111]}, \pi/4) = 1/3$, $\eta(\theta_{[111]}, \pi/4) = 1/27$, для коэффициентов a_i^λ , b_i^λ , c_i^λ найдем:

$$\begin{aligned}
a_1^\lambda &= 4(A_{[110]}^\lambda - A_{[100]}^\lambda) / A_{[100]}^\lambda, \quad a_2^\lambda = 9(3A_{[111]}^\lambda - 4A_{[110]}^\lambda + A_{[100]}^\lambda) / A_{[100]}^\lambda, \\
b_1^\lambda &= 4(B_{[110]}^\lambda - B_{[100]}^\lambda) / B_{[100]}^\lambda, \quad b_2^\lambda = 9(3B_{[111]}^\lambda - 4B_{[110]}^\lambda + B_{[100]}^\lambda) / B_{[100]}^\lambda, \\
c_1^\lambda &= 4(C_{[110]}^\lambda - C_{[100]}^\lambda) / C_{[100]}^\lambda, \quad c_2^\lambda = 9(3C_{[111]}^\lambda - 4C_{[110]}^\lambda + C_{[100]}^\lambda) / C_{[100]}^\lambda.
\end{aligned} \tag{1.46}$$

Значения этих коэффициентов для кристаллов Si и Ge приведены в таблице 1.3. 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 ($x \sim 1$).

Сравнение спектров, рассчитанных согласно формулам (1.42) - (1.46) для Si и Ge с экспериментальными данными [60,61] показало, что для всех акустических мод 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 (см. рис. 1.5, кривые 5). На границе зоны Бриллюэна в симметричных направлениях погрешность аппроксимации мала - она не превосходит 1.5%. Однако в направлениях, отличных от симметричных, максимальное отклонение от экспериментальных данных может достигать 20%.

Следует отметить, что для кристаллов Ge в работе [60] были измерены зависимости спектра фононов от приведенного волнового вектора в направлениях типа [210]. Поэтому для волновых векторов в пло-

скости грани куба спектр акустических мод может быть уточнен. Для направления [210] проведём аппроксимацию спектра полиномом седьмой степени подобно тому, как это делалось для симметричных направлений, и определим коэффициенты $A_{[210]}^\lambda$, $B_{[210]}^\lambda$, $C_{[210]}^\lambda$ (см. таблицу 1.4). Поскольку в плоскости грани куба $\eta = 0$, то в качестве третьей

Таблица 1.3

Параметры, определяющие аппроксимацию спектра фононов в Si и Ge, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов на всю зону Бриллюэна [39, 63].

| Продольная мода | | | | | | Поперечные моды | | | | | |
|-----------------|-------|-------|---------|---------|--------|------------------|------|------|------------|-------|-------|
| | Si | Ge | | Si | Ge | | Si | Ge | | Si | Ge |
| $A_{[001]}^L$ | 0.27 | 0.20 | a_1^L | 9.60 | 13.5 | $A_{[001]}^I$ | 1.35 | 1.45 | a_1^{I1} | -1.91 | -1.91 |
| $B_{[001]}^L$ | 0.13 | 0.10 | a_2^L | -77.67 | -116.2 | $B_{[001]}^I$ | 1.22 | 1.27 | a_2^{I1} | 17.25 | 16.71 |
| $C_{[001]}^L$ | 0.064 | 0.073 | b_1^L | 18.21 | 25.9 | $C_{[001]}^I$ | 0.45 | 0.44 | b_1^{I1} | -1.63 | -2.21 |
| $A_{[101]}^L$ | 0.91 | 0.87 | b_2^L | -129.44 | -231.9 | $A_{[101]}^{I1}$ | 0.71 | 0.76 | b_2^{I1} | 14.94 | 21.49 |
| $B_{[101]}^L$ | 0.72 | 0.75 | c_1^L | 8.86 | 9.64 | $B_{[101]}^{I1}$ | 0.72 | 0.57 | c_1^{I1} | -0.26 | -1.43 |
| $C_{[101]}^L$ | 0.21 | 0.25 | c_2^L | -30.51 | -80.9 | $C_{[101]}^{I1}$ | 0.43 | 0.28 | c_2^{I1} | 2.66 | 17.47 |
| $A_{[111]}^L$ | 0.35 | 0.24 | | | | $A_{[101]}^{I2}$ | 0.90 | 0.98 | a_1^{I2} | -1.34 | -1.29 |
| $B_{[111]}^L$ | 0.30 | 0.11 | | | | $B_{[101]}^{I2}$ | 0.56 | 0.69 | a_2^{I2} | 12.12 | 11.11 |
| $C_{[111]}^L$ | 0.18 | 0.089 | | | | $C_{[101]}^{I2}$ | 0.16 | 0.23 | b_1^{I2} | -2.18 | -1.81 |
| | | | | | | $A_{[111]}^I$ | 1.35 | 1.42 | b_2^{I2} | 19.81 | 17.88 |
| | | | | | | $B_{[111]}^I$ | 1.23 | 1.34 | c_1^{I2} | -2.56 | -1.92 |
| | | | | | | $C_{[111]}^I$ | 0.46 | 0.51 | c_2^{I2} | 23.44 | 21.84 |

гармоники возьмем $(\xi(\theta, \varphi))^2$. В этом случае выражения для коэффициентов $A^\lambda(\theta, \varphi)$, $B^\lambda(\theta, \varphi)$, $C^\lambda(\theta, \varphi)$ примут вид

$$\begin{aligned}
 A^\lambda(\theta, \varphi) &= A_{[001]}^\lambda \left\{ 1 + a_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + a_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) + a_3^\lambda \xi^2(\theta, \varphi) \right\} \\
 B^\lambda(\theta, \varphi) &= B_{[001]}^\lambda \left\{ 1 + b_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + b_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) + b_3^\lambda \xi^2(\theta, \varphi) \right\} \\
 C^\lambda(\theta, \varphi) &= C_{[001]}^\lambda \left\{ 1 + c_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + c_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) + c_3^\lambda \xi^2(\theta, \varphi) \right\}
 \end{aligned} \tag{1.47}$$

Учтем, что для направления $[210]$ $\xi(\pi/2, \varphi_{[210]}) = 4/25$, $\eta(\pi/2, \varphi_{[210]}) = 0$. Тогда для коэффициентов a_i^λ , b_i^λ , c_i^λ , определяющих спектр фононов с учетом квадратичного члена по кубическим гармоникам найдем:

$$\begin{aligned}
 a_1^\lambda &= (-369A_{[100]}^\lambda - 256A_{[110]}^\lambda + 625A_{[210]}^\lambda)/(36A_{[100]}^\lambda), \\
 a_2^\lambda &= (-117A_{[100]}^\lambda - 832A_{[110]}^\lambda + 324A_{[111]}^\lambda + 625A_{[210]}^\lambda)/(12A_{[100]}^\lambda), \\
 a_3^\lambda &= 25(9A_{[100]}^\lambda + 16A_{[110]}^\lambda - 25A_{[210]}^\lambda)/(9A_{[100]}^\lambda), \\
 b_1^\lambda &= (-369B_{[100]}^\lambda - 256B_{[110]}^\lambda + 625B_{[210]}^\lambda)/(36B_{[100]}^\lambda), \\
 b_2^\lambda &= (-117B_{[100]}^\lambda - 832B_{[110]}^\lambda + 324B_{[111]}^\lambda + 625B_{[210]}^\lambda)/(12B_{[100]}^\lambda), \quad (1.48) \\
 b_3^\lambda &= 25(9B_{[100]}^\lambda + 16B_{[110]}^\lambda - 25B_{[210]}^\lambda)/(9B_{[100]}^\lambda), \\
 c_1^\lambda &= (-369C_{[100]}^\lambda - 256C_{[110]}^\lambda + 625C_{[210]}^\lambda)/(36C_{[100]}^\lambda), \\
 c_2^\lambda &= (-117C_{[100]}^\lambda - 832C_{[110]}^\lambda + 324C_{[111]}^\lambda + 625C_{[210]}^\lambda)/(12C_{[100]}^\lambda), \\
 c_3^\lambda &= 25(9C_{[100]}^\lambda + 16C_{[110]}^\lambda - 25C_{[210]}^\lambda)/(9C_{[100]}^\lambda).
 \end{aligned}$$

Значения этих коэффициентов для кристалла Ge приведены в таблице 1.4. Для того чтобы проиллюстрировать изменение аппроксимационного спектра фононных мод для волновых векторов в плоскости грани куба при учете квадратичного члена по кубическим гармоникам сравним, зависимости, приведенные на рисунках 1.6 и 1.7. Как видно из рисунков, учет гармоники $(\xi(\theta, \varphi))^2$ позволяет существенно улучшить согласие результатов аппроксимации с экспериментальными данными на границе зоны Бриллюэна. При учете квадратичной гармоники максимальная погрешность аппроксимации спектра в плоскости грани куба уменьшается для продольных фононов с 17 до 4%, для быстрой моды погрешность остается равной 8%, а для медленной поперечной моды она уменьшается до 5%. Таким образом мы показали, что при наличии экспериментальных данных для несимметричных сечений можно значительно уменьшить погрешность аппроксимации спектра

включив в разложение члены более высокого порядка по кубическим гармоникам $\xi(\theta, \varphi)$ и $\eta(\theta, \varphi)$.

Таблица 1.4

Параметры, определяющие аппроксимацию спектра фононов в кристаллах Ge на всю зону Бриллюэна с учетом направления [210].

| | Продольная мода | Мода t_1 | Мода t_2 |
|---------------------|-----------------|------------|------------|
| $A_{[210]}^\lambda$ | 1.05 | 1.17 | 1.10 |
| $B_{[210]}^\lambda$ | 1.22 | 1.13 | 1.06 |
| $C_{[210]}^\lambda$ | 0.59 | 0.48 | 0.39 |
| a_1^λ | 49.96 | -0.68 | -2.53 |
| a_2^λ | -5.51 | 20.31 | 7.84 |
| a_3^λ | -146.0 | -5.55 | 4.16 |
| b_1^λ | 148.84 | -0.52 | -1.93 |
| b_2^λ | 136.82 | 25.03 | 17.03 |
| b_3^λ | -491.6 | -8.28 | -1.4 |
| c_1^λ | 105.3 | -0.63 | -2.43 |
| c_2^λ | 206.1 | 19.59 | 18.04 |
| c_3^λ | -382.6 | -6.73 | -0.83 |

В дальнейшем, чтобы не усложнять задачу расчета теплопроводности, ограничимся линейной по кубическим гармоникам аппроксимацией спектра согласно выражениям (1.45). В качестве примера рассмотрим изменение фазовой скорости фононов в Si при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам:

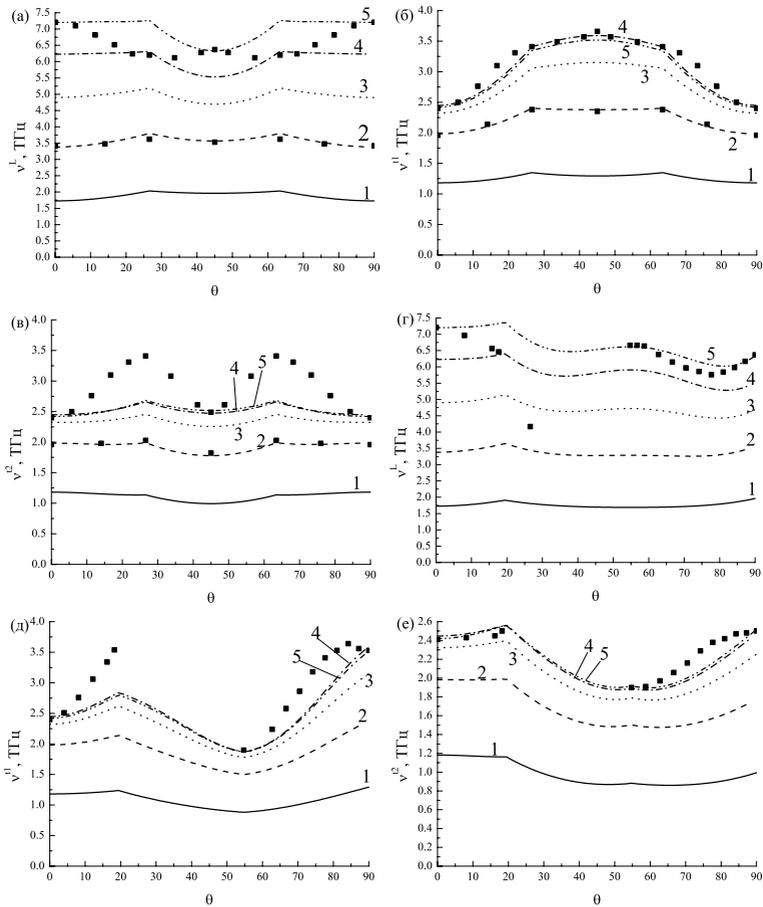


Рис. 1.6. Фононный спектр Ge с учетом дисперсии тепловых фононов в линейном приближении по кубическим гармоникам при $x=0.2$ (1), $x=0.4$ (2), $x=0.6$ (3), $x=0.8$ (4), $x=1$ (5) в плоскости грани куба (а, б, в) и в диагональной плоскости (г, д, е).

Продольная мода – а, г; t_1 – б, д; t_2 – в, е.

Символы – экспериментальные значения [60,61]

$$S^\lambda(x, \theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)\}. \quad (1.49)$$

Как видно из рисунков 1.8, анизотропия фазовой скорости фононов качественно изменяется при переходе от модели анизотропного континуума $x=0$ (рис. 1.8, кривые 1) к фазовым скоростям на границе

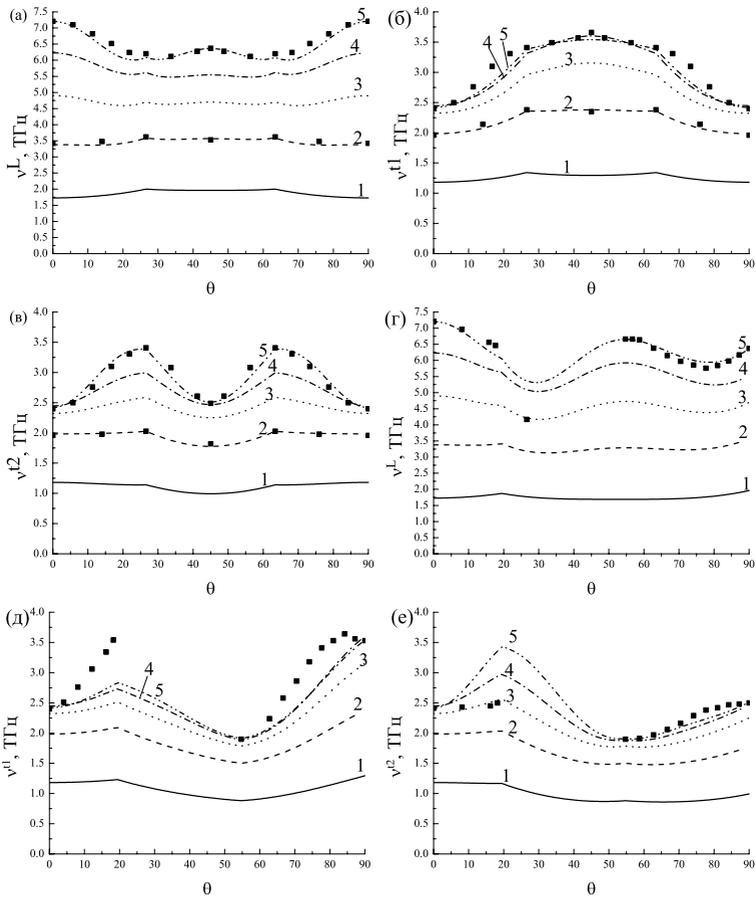


Рис. 1.7. Фононный спектр Ge с учетом дисперсии тепловых фононов в квадратичном приближении по кубическим гармоникам при $x=0.2$ (1), $x=0.4$ (2), $x=0.6$ (3), $x=0.8$ (4), $x=1$ (5) для волновых векторов в плоскости грани куба (а, б, в) и в диагональной плоскости (г, д, е). Продольная мода – а, г; t_1 – б, д; t_2 – в, е. Символы – экспериментальные значения [60,61]

зоны Бриллюэна $x=1.0$ (рис. 1.8, кривые 5). Если при $x=0$ 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. 1.8а).

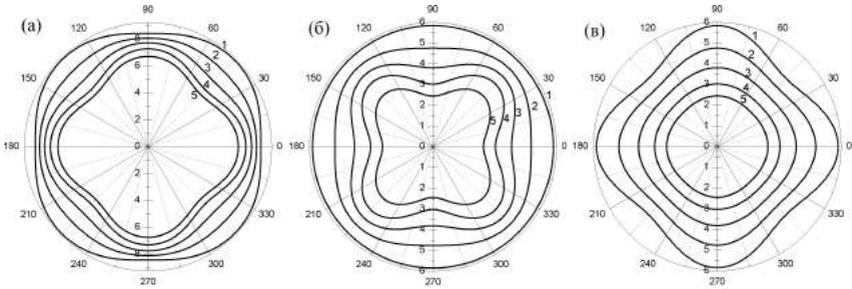


Рис. 1.8. Угловые зависимости фазовых скоростей $S^\lambda(x, \theta, 0)$ (10^5 см/с) в кристаллах кремния для волновых векторов в плоскости грани куба: (а) – для продольных, (б) – для быстрых и (в) – для медленных поперечных фононов от угла ϑ при значениях приведенного волнового вектора $x=0$ (кривые 1), $x=0.4$ (кривые 2), $x=0.6$ (кривые 3), $x=0.8$ (кривые 4), $x=1$ (кривые 5)

Качественно изменяется и анизотропия фазовых скоростей поперечных фононов обеих колебательных ветвей (см. рис. 1.8а и 1.8б). 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. рис. 1.5). 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. 1.5). 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

Проведем расчет теплоемкости кристаллов Si и Ge с использованием модели анизотропного континуума и аппроксимационного спек-

тра тепловых фононов в соответствии с формулами (1.28) и (1.42). Сравним результаты расчета с экспериментальными данными [64,65]. Определим насколько предложенная нами аппроксимация спектра тепловых фононов улучшает согласие расчетов теплоемкости кристаллов Si и Ge с результатами [64,65] по сравнению с моделью анизотропного континуума. Выражение для молярной теплоемкости, согласно [9,41,66], имеет вид

$$C_V^\lambda = V_M C_V^\lambda = \frac{k_B \cdot V_M}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} z_\lambda^2 \frac{\exp(z_\lambda)}{(\exp(z_\lambda) - 1)^2}, \quad z_\lambda = \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}^\lambda}{k_B T}, \quad (1.50)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура, $\omega_{\mathbf{q}}^\lambda$ – 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. Верхний предел интегрирования по \mathbf{q} в выражении (1.50) определяется дебаевским волновым вектором q_D [66]

$$q_D = (6\pi^2 N/V)^{1/3} = (6\pi^2 N_A/V_M)^{1/3}, \quad (1.51)$$

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 (1.50) следует, что теплоемкость следует согласно *закону Дебая* зависимости T^3 . В случае высоких температур ($T \gg T_D$) из формулы (1.50) получаем известный *закон Дюлонга и Пти*, согласно которому молярная теплоемкость всех твердых тел при высоких температурах стремится к пределу

$$C_V = 3k_B N_A = 3R. \quad (1.52)$$

В экспериментах [64,65] измерялась теплоемкость при постоянном давлении C_P для кристаллов Si и Ge. В работе [65] 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 с экспериментальными данными. Как видно из рисунка 1.9, при температурах ниже 6 и 10 К (соответственно для кристаллов Ge и Si) основной вклад в теплоемкость вносят длинноволновые фононы. Поэтому пунктирные кривые,

рассчитанные в модели анизотропного континуума, хорошо согласуются с данными [64,65]. При более высоких температурах модель анизотропного континуума дает завышенные значения для энергии фононных мод и, соответственно, заниженные значения теплоемкости для кристаллов Ge и Si. Причем, максимальное отклонение от эксперимента для кристаллов Ge имеет место при $T = 15-30$ К, а для Si – при $T = 25-55$ К и составляет 55-65%. Для этих интервалов рассчитанные значения теплоемкости оказываются в 2.7 раза меньше экспериментальных данных [64,65] (см. рис. 1.9б, кривая 1а). Основной вклад в это отклонение вносит пренебрежением сильной дисперсией поперечных фононов (см. рисунок 1.5). Как видно из рисунка 1.5, при $q > q_D/2$

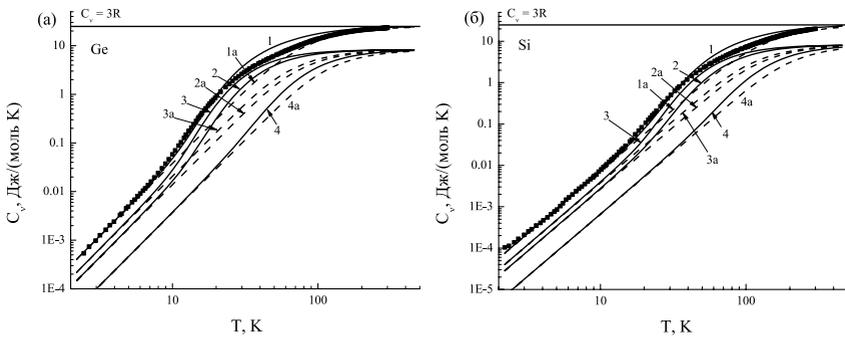


Рис. 1.9. Температурные зависимости молярной теплоемкости кристаллов Ge (а) и Si (б) в модели анизотропного континуума (кривые 1а, 2а, 3а, 4а) и с учетом дисперсии тепловых фононов (кривые 1, 2, 3, 4). Кривые 1 – полная теплоемкость, кривые 2 – для быстрой поперечной моды, кривые 3 – для медленной поперечной моды и кривые 4 – для продольной моды. Прямая $C_V = 3R = 24.9$ Дж/(моль К) – классический закон Дюлонга и Пти (1.52). Символы – эксперимент [64,65]

спектр медленной моды выходит на плоский участок, что приводит к значительному увеличению вклада этой моды в теплоемкость. Из сравнения температурных зависимостей, рассчитанных в модели анизотропного континуума (кривая 3) и учетом дисперсии с использованием аппроксимационного спектра (кривая 3а) видно, что в указанном интервале вклад в теплоемкость от моды t_2 возрастает в 2.5 раза, что значительно уменьшает расхождение результатов расчета с данными эксперимента. При этом расчет теплоемкости с использованием аппроксимационного спектра тепловых фононов для кристаллов Ge при темпера-

турах, меньших 20 К, а для Si, меньших 37 К согласуются с экспериментальными данными в пределах погрешности, не превышающей 5%. При увеличении температуры возрастает роль коротковолновых фононов, и расхождение результатов расчета и экспериментальных данных возрастает. В этой области результаты расчета лежат выше экспериментальных данных. Это означает, что наша аппроксимация несколько переоценивает роль дисперсии для коротковолновых фононов в направлениях отличных от симметричных. Максимальное отклонение для кристаллов Ge и Si достигается при $T = 30-40$ К и при $T = 55-70$ К, соответственно, и составляет 40-50% (см. рис. 1.9). При $T > 300$ К молярная теплоемкость для обеих моделей, как и экспериментальные данные, стремятся к значению $3R$, при этом вклады в теплоемкость от различных ветвей фононного спектра оказываются равными друг другу (см. рисунок 1.9). Во всей области температур доминирующий вклад в теплоемкость вносит медленная поперечная мода (кривые 3, 3а). Например, для кристалла Si при $T = 3$ К ее вклад составляет 53 %, а при $T = 40-50$ – 61%. Вклад продольных фононов значительно меньше вкладов поперечных фононов. Он составляет 9% при $T = 3$ К и 4% при $T = 40-50$.

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.

1.4. ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ И ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ФОНОНОВ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ АНИЗОТРОПИИ УПРУГОЙ ЭНЕРГИИ

В упруго анизотропных кристаллах из-за неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононный поток, излучаемый точечным источником тепла, фокусируется вдоль определенных направлений в кристаллической решетке [16-18]. Для иллюстрации этого эффекта на рисунке 1.10 приведены три случая изоэнергетической поверхности (поверхности постоянной частоты). В изотропной среде направление групповой, фазовой скоростей фононов и направление волнового вектора совпадают. Эффект фокусировки отсутствует: плотность состоя-

ний изотропна — она постоянна для всех направлений (см. рис. 1.10а). В кубических кристаллах анизотропия упругих свойств приводит к эффекту фокусировки фононов, т. е. возникновению направлений, в которых будут преимущественно распространяться фононы данной колебательной моды [16-18]. Для иллюстрации этого эффекта на рисунках 1.10 б,в приведены случаи, когда поверхность постоянной частоты в сечении имеют вид квадрата со сторонами перпендикулярными направлениям типа $[100]$ и $[101]$. Поскольку групповая скорость перпендикулярна поверхности постоянной частоты, то значительная часть фононов будет распространяться в направлениях типа $[100]$ в первом случае и в направлениях $[101]$ — во втором. Очевидно, что в первом случае фононы фокусируются в направлениях типа $[100]$ и дефокусируются в направлениях типа $[101]$. Во втором случае — наоборот: фокусировка фононов происходит в направлениях $[101]$, а дефокусировка — в направлениях $[100]$.

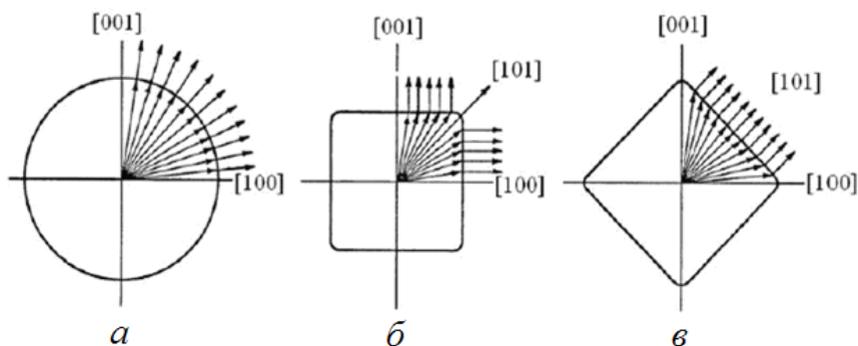


Рис. 1.10. Схема сечений изоэнергетических поверхностей, иллюстрирующая фокусировку фононов: (а) — изотропный случай, (б) — фокусировка в направлении $[100]$, (в) — фокусировка в направлении $[101]$

Рассмотрим фокусировку фононов в кубических кристаллах с положительной (LiF, GaAs, InSb, Ge, Si, MgO, алмаз, YAG) и отрицательной (CaF₂, NaCl, YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка в модели анизотропного континуума. В разделе 1.1 показано, что угловые зависимости фазовых скоростей для всех акустических мод в кубических кристаллах одного типа качественно подобны: максимальные и минимальные значения фазовых скоростей для всех кристаллов дости-

гаются в одних и тех же направлениях. Они отличаются только большей или меньшей анизотропией фазовых скоростей (см. рис. 1.1а). Угловые зависимости фазовых скоростей для всех акустических мод в кубических кристаллах разного типа качественно отличаются: максимальные значения фазовых скоростей в кристаллах первого типа соответствуют минимальным значениям для кристаллов второго типа (см. раздел 1.1).

В качестве примера кристаллов первого типа рассмотрим Si и Ge, а второго типа CaF_2 . Важной характеристикой, определяющей фононный транспорт и фокусировку фононов в упруго анизотропных кристаллах, является групповая скорость. Для произвольного направления волнового вектора она может быть представлена в виде [40]:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_g^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi), \quad \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi) = \mathbf{n} + S_\theta^\lambda \mathbf{e}_\theta + S_\varphi^\lambda \mathbf{e}_\varphi, \\ S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) &= \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \theta}, \quad S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Здесь $\mathbf{e}_\theta = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta)$, $\mathbf{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$, а \mathbf{n} - единичный волновой вектор фонона. Вектора \mathbf{n} , \mathbf{e}_θ и \mathbf{e}_φ образуют взаимно ортогональную тройку единичных векторов.

Проиллюстрируем влияние фокусировки фононов на распространение фононных мод в кристаллах Si и CaF_2 для наиболее простого случая волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба $\{100\}$ ($\varphi = 0$). В этом случае $S_\varphi^\lambda(\theta, 0) = 0$, и только угловая компонента S_θ^λ определяет отклонение вектора групповой скорости от направления волнового вектора. На угловых зависимостях фазовых скоростей $S^\lambda(\theta, 0)$ маленькими стрелками отметим направления угловой компоненты вектора групповой скорости S_θ^λ (см. рис. 1.11 а,б). 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 направления волнового вектора. Можно отметить, что вектор групповой скорости отклоняется в сторону максимальных значений фазовой скорости. Так, например, для медленной поперечной моды в кремнии в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_\theta^{t2} < 0$, а при $\pi/4 \leq \theta \leq \pi/2$ она становится положительной, поэтому вектор

групповой скорости для моды t_2 будет отклоняться к направлениям [001] и [010] (см. рис. 1.10 а, в). В этих направлениях фокусируются фононы медленной поперечной моды. Для продольных фононов в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_\theta^L > 0$, а при $\pi/4 \leq \theta \leq \pi/2$ $S_\theta^L < 0$, поэтому вектора групповой скорости будут отклоняться от \mathbf{n} к направлению фокусировки [101] (см. рис. 1.11а, б). Эти направления

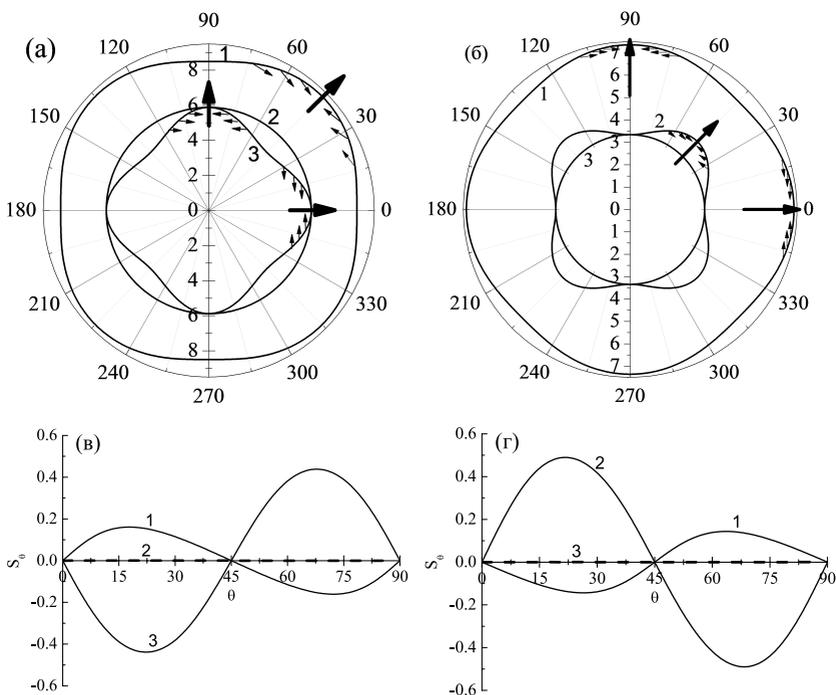


Рис. 1.11. Угловые зависимости фазовых скоростей $S^\lambda(\theta, 0)$ (10^5 см/с) (а, б) и безразмерных компонент групповой скорости $S_\theta^\lambda(\theta, 0)$ (в, г) в кристаллах Si (а, в) и CaF₂ (б, г) для волновых векторов в плоскости грани куба. Кривые 1 – для продольных фононов, 2 – для быстрых и 3 – для медленных поперечных фононов.

Направления фокусировки отмечены жирными радиальными стрелками

на рисунке 1.11а отмечены жирными радиальными стрелками. Для быстрой поперечной моды в Si в плоскости {100} спектр изотропен и эффект фокусировки отсутствует. Заметим, что в изотропных средах $S_\theta^\lambda = S_\varphi^\lambda = 0$, направления групповых и фазовых скоростей совпадают,

и эффект фокусировки в них отсутствует. Для волновых векторов в плоскостях типа $\{100\}$ это равенство выполняется для быстрых поперечных мод в кристаллах первого типа и для медленных поперечных мод в кристаллах второго типа, поэтому для них эффект фокусировки отсутствует.

Как видно из рисунков 1.11 в,г (кривые 2), фононы быстрой поперечной моды в кристаллах CaF_2 отклоняются от направлений $[001]$ к направлениям фокусировки $[101]$. Для продольных фононов – наоборот: вектора групповой скорости будут отклоняться от направлений $[101]$ к направлениям фокусировки $[001]$. Направления фокусировки на рисунке 1.11в отмечены жирными радиальными стрелками. В одном и том же кристалле они различны для разных мод.

Для кристаллов одного типа направления фокусировки и дефокусировки колебательных мод совпадают, тогда как направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки в кристаллах второго типа. Так, например, в кристаллах Si продольные фононы фокусируются в направлениях типа $[101]$, а дефокусируются в направлениях типа $[001]$, тогда как в кристаллах CaF_2 продольные фононы фокусируются в направлениях типа $[001]$, а дефокусируются в направлениях типа $[111]$. Медленная мода в Si с вектором поляризации в плоскости грани куба фокусируется в направлениях типа $[001]$, и дефокусируется в направлениях $[101]$, тогда как для быстрой поперечной моды в CaF_2 , имеющей вектор поляризации в плоскости грани куба, направления фокусировки и дефокусировки – противоположны. Таким образом, имеется глубокая физическая основа под классификацией кубических кристаллов, предложенной в работе [44].

Из проведенного выше анализа следует, что можно предложить простой способ определения направлений фокусировки фононов, не привлекая сложных построений с групповыми скоростями. Как видно из рисунков 1.11, направления фокусировки фононов совпадают с направлениями, в которых достигаются максимумы фазовых скоростей фононов. Поэтому для определения направлений фокусировки достаточно построить угловые зависимости $S_0^2(\theta, \varphi)$ и определить направления максимумов фазовых скоростей.

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

1.5. ВЛИЯНИЕ ФОКУСИРОВКИ НА ПЛОТНОСТЬ ФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

Предложенный выше способ анализа направлений компонент групповых скоростей позволяет определить лишь направления фокусировки и дефокусировки фононов. Для того, чтобы количественно проанализировать влияние анизотропии упругой энергии на распространение акустических мод в кубических кристаллах и оценить влияние фокусировки фононов на плотность фононных состояний, необходимо построить изоэнергетическую поверхность или поверхность постоянной частоты [67,68]

$$\mathbf{q} = \mathbf{n} \cdot \omega^\lambda / S^\lambda(\theta, \varphi). \quad (1.54)$$

Тогда из определения (1.54) следует, что вектор групповой скорости фонона \mathbf{V}_g^λ будет ортогонален изоэнергетической поверхности. Это позволяет однозначно сопоставить волновым векторам фононов соответствующие вектора групповых скоростей для всех акустических мод и определить углы между направлениями групповых и фазовых скоростей. В теории упругих волн также используются другие определения эквивалентные поверхности постоянной частоты: поверхность медленности [18], обратная поверхность [68] или поверхность рефракции [42]. Эти поверхности можно получить из поверхности постоянной частоты путем деления выражения (1.54) на частоту ω [18,42,68]. Поверхность медленности является геометрическим местом концов вектора ζ^λ , отложенных от одной точки:

$$\zeta^\lambda = \mathbf{q} / \omega^\lambda = \mathbf{n} / S^\lambda(\theta, \varphi). \quad (1.55)$$

В монографии [42] этот вектор определен как вектор рефракции. В отечественной литературе для этой поверхности чаще используются термины изоэнергетическая поверхность или поверхность постоянной частоты [67]. Поэтому мы будем придерживаться этой терминологии. Графическое изображение изоэнергетической поверхности позволяет наглядно представить и количественно оценить особенности распространения фононных мод в наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии.

Ниже при анализе влияния фокусировки на распространение фононов и плотность фоновых состояний в упруго анизотропных кристаллах мы будем пользоваться результатами работ [69-71]. Из рисунка 1.1 видно, что максимальную анизотропию в плоскости $\{100\}$ и $\{110\}$ имеют фазовые скорости $S^2(\theta, \varphi)$ для медленных и быстрых поперечных мод. Проиллюстрируем фокусировку фононов на примере мод t_1 и t_2 в кристаллах Si и CaF₂ для волновых векторов, лежащих в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$. Построим для них изоэнергетические поверхности (см. рис 1.12). Групповая скорость фонона, определяющая направление

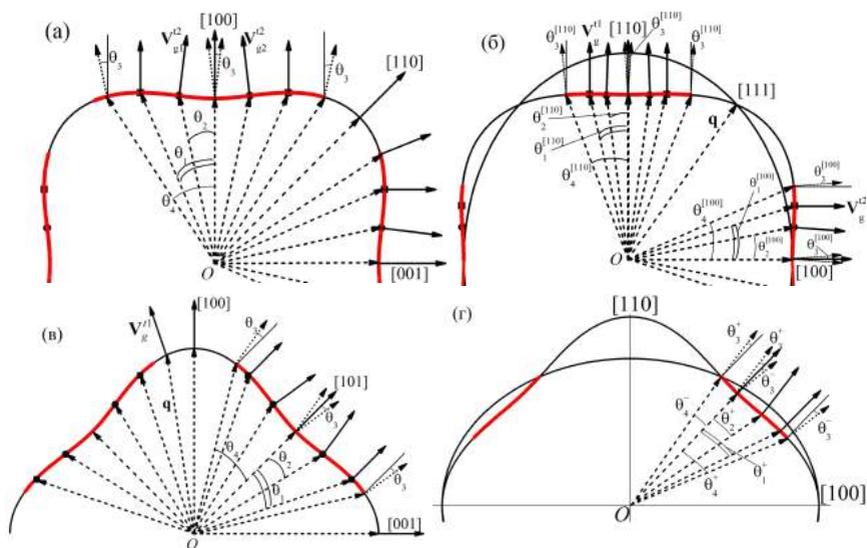


Рис. 1.12. Схема, иллюстрирующая фокусировку медленных и быстрых поперечных мод в кристаллах Si (а), (б) и CaF₂ (в), (г) для сечений изоэнергетической поверхности плоскостью XZ (а), (в) для моды t_2 и диагональной плоскостью для мод t_1 и t_2 (б), (г). Стрелками изображены волновые вектора внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её

переноса энергии, перпендикулярна этой поверхности. Как видно из рисунков 1.12, фокусировка фононов характеризуется следующими углами: θ_1 , θ_2 , θ_3 и θ_4 . Угол θ_1 определяет направление волнового вектора, для которого вектор групповой скорости $V_g^{t_2}(\theta_g)$ параллелен направлению фокусировки. Для кристаллов первого типа и волновых

векторов в плоскости $\{100\}$ - направлению $[001]$, поэтому $\theta_g^\lambda = n\pi/2$, где n – целое число (см. рис. 1.12). Характерными особенностями на изоэнергетической поверхности (поверхности медленности) являются линии нулевой кривизны, в которых происходит переход от выпуклых к вогнутым областям (см. рис. 1.12 (а)). В трехмерном случае множество этих точек образуют линии нулевой кривизны. Для выбранного сечения углы $\pm\theta_2$ задают направления волновых векторов к точкам нулевой кривизны. Они отсчитываются от направлений фокусировки (см. рис. 1.12). Углы $\pm\theta_3$ определяют направления групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности. В этих точках вектора групповых скоростей фононов имеют максимальное схождение к направлению $[100]$, и этот угол мы обозначим, как $\theta_3 = \theta_g^\lambda(\theta_2)$ (см. рис. 1.12). Очевидно, что величину сектора волновых векторов, соответствующих области фокусировки, будут определять групповые скорости $\mathbf{V}_g^{i2}(\pm\theta_4)$, коллинеарные векторам \mathbf{V}_g^{i2} в точках нулевой кривизны, а именно $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ (см. рис. 1.12).

Для нахождения характерных углов $\theta_i^{i2\{100\}}$ определим направление групповой скорости $\theta_g^\lambda(\theta, \varphi)$ через угловые координаты волнового вектора θ и φ . Из условия $(\mathbf{V}_g^\lambda \mathbf{q}) = V_g^\lambda q \cos(\alpha^\lambda(\theta, \varphi))$ определим угол между групповой скоростью и волновым вектором

$$\alpha^\lambda(\theta, \varphi) = \pm \arccos \left(1 + (S_\theta^\lambda)^2 + (S_\varphi^\lambda)^2 \right)^{0.5}. \quad (1.56)$$

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

$$\alpha^\lambda(\theta) = \arctg S_\theta^\lambda(\theta). \quad (1.57)$$

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

$$\theta_g^\lambda = \theta + \alpha^\lambda = \theta + \arctg S_\theta^\lambda(\theta). \quad (1.58)$$

Из последнего равенства следует, что знак компоненты $S_\theta^\lambda(\theta)$ определяет, в какую сторону будет отклоняться вектор групповой скорости относительно волнового вектора фонона. Поскольку в изотроп-

ной среде направления фазовой и групповой скоростей фонона совпадают с направлением волнового вектора фонона, то мы получаем возможность рассматривать модель изотропной среды как систему сравнения при анализе влияния фокусировки фононов на изменение плотности фононных состояний в упруго анизотропных кристаллах. На рисунке 1.13 приведена схема расчета характерных углов $\theta_i^{2\{100\}}$. Угол $\theta_1^{2\{100\}}$ определяется из условия $\theta_g^\lambda = 0$:

$$\theta_1 + \arctg S_\theta^\lambda(\theta_1) = 0. \quad (1.57)$$

Для нахождения углов θ_2 и θ_3 необходимо построить функцию $\theta_g^{i2}(\theta, 0)$ (кривая 3)

$$\theta_g^\lambda(\theta) = \theta + \arctg S_\theta^\lambda(\theta). \quad (1.58)$$

и найти её минимум. Положение минимума $d\theta_g^{i2}(\theta, 0)/d\theta \big|_{\theta=\theta_2} = 0$ определяет точку нулевой кривизны с углом θ_2 , а значение функции $\theta_g^\lambda(\theta_2)$ даёт величину угла θ_3 (см. рис.1.13).

$$\theta_3 = \theta_2 + \arctg S_\theta^\lambda(\theta_2). \quad (1.59)$$

После этого построим вектора групповых скоростей $\mathbf{V}_g^{i2}(\pm\theta_2^{i2})$ и определим углы «схождения» групповых скоростей $\pm\theta_3$. Угол $2\theta_3$ определяет область фокусировки фононов. Очевидно, что величину сектора волновых векторов, соответствующих фокусировке фононов, будут определять групповые скорости $\mathbf{V}_g^{i2}(\pm\theta_4^{i2})$, коллинеарные направлениям \mathbf{V}_g^{i2} в точках нулевой кривизны, а именно $-\theta_4^{i2} \leq \theta \leq \theta_4^{i2}$ (см. рис. 1.12). Уравнение для определения угла θ_4^λ имеет вид:

$$\theta_3^\lambda = \theta_g^\lambda(\theta_4^\lambda) = \theta_4^\lambda + \arctg S_\theta^\lambda(\theta_4^\lambda). \quad (1.60)$$

Для графического определения угла θ_4 на рисунке 1.13 проводим горизонтальную линию на высоте θ_3 до пересечения с кривой 3 (см. рис. 1.13). Точка пересечения $\theta_g^\lambda(\theta_4^\lambda) = \theta_3^\lambda$ даст нам угол θ_4^λ , который определяет сектор фокусировки $-\theta_4^\lambda \leq \theta \leq \theta_4^\lambda$ в пространстве волновых векторов. Таким образом, расходящийся сектор волновых векто-

ров $-\theta_4^\lambda \leq \theta \leq \theta_4^\lambda$ в плоскости $\{100\}$ для моды t_2 превращается в сходящийся к направлению $[001]$ сектор групповых скоростей $-\theta_3^\lambda \leq \theta_g \leq \theta_3^\lambda$.

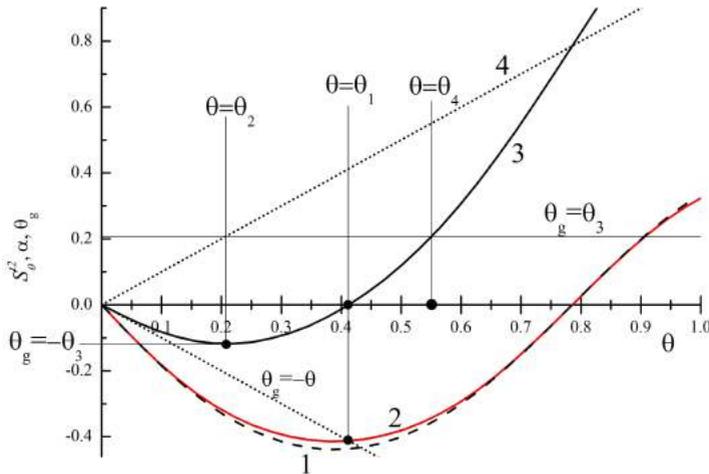


Рис. 1.13. Схема расчета характерных углов θ_1 , θ_2 , θ_3 и θ_4 для моды t_2 в кремнии: кривая 1 - функция $S_\theta^{t_2}(\theta, 0)$, кривая 2 - функция $\alpha^{t_2}(\theta, 0)$, кривая 3 - функция $\theta_g^{t_2}(\theta, 0)$, кривая 4 - функция $\theta_g^{t_2} = \theta$.

В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают, поэтому фононы, распространяющиеся в изотропной среде в секторе $-\theta_4^\lambda \leq \theta \leq \theta_4^\lambda$, в упруго анизотропных кристаллах будут распространяться в существенно меньшем секторе $-\theta_3^\lambda \leq \theta_g \leq \theta_3^\lambda$ (см. рис. 1.12). Таким образом, плотность состояний для этой моды в направлениях фокусировки близких к $[100]$ существенно возрастает по сравнению с изотропной средой. Предложенный нами метод позволяет сделать количественные оценки изменения угловых распределений плотности фононных состояний для медленных квазипоперечных мод в исследуемых кристаллах. Для этого введем среднюю плотность фононных состояний моды t_2 для волновых векторов в плоскости $\{100\}$, приходящуюся на единичный угол для областей фокусировки $-\theta_3^{t_2} \leq \theta_g \leq \theta_3^{t_2}$ $N_F^{t_2 \{100\}}$ и изотропной среды N_{iso} . Поскольку расходящийся сектор волновых векторов для изотропной среды в плоскости $\{100\}$ с углом $2\theta_4^{t_2 \{100\}}$ (например, для Ge и Si углы $2\theta_4$ равняются 62.9° и 57.3° , соответственно) превращается в расходящийся сек-

тор векторов групповых скоростей фононов с углом $2\theta_3^{\{2\{100\}}$ (например, для Ge и Si углы $2\theta_3^{\{2\{100\}}$ равняются 18.8° и 13.6° , соответственно), то средняя плотность состояний в областях фокусировки фононов будет больше, чем в изотропной среде в отношении:

$$n_{FI}^{\{2\{100\}} = N_F^{\{2\{100\}} / N_{Iso} = \theta_4^{\{2\{100\}} / \theta_3^{\{2\{100\}}. \quad (1.61)$$

Минимальное значение в кристаллах первого типа параметр $n_{FI}^{\{2\{100\}} = 1.98$ имеет место для GaN, а максимальное $n_{FI}^{\{2\{100\}} = 4.98$ – для MgO (см. таблицу 1.5). Из рассмотренных материалов следует, что нет прямой корреляции между величиной параметра анизотропии $k-1$ и значением коэффициента $n_{FI}^{\{2\{100\}}$. Скорее всего имеет место обратная зависимость: чем больше параметр $k-1$, тем меньше коэффициент $n_{FI}^{\{2\{100\}}$. Для кристаллов GaN $k-1=1.275$, а коэффициент $n_{FI}^{\{2\{100\}}$ минимален, тогда как для MgO параметр $k-1=0.69$ имеет одно из минимальных значений в таблице 1.2, а коэффициент $n_{FI}^{\{2\{100\}}$ максимален. Такая же ситуация имеет место в кристаллах второго типа моды t_1 (см. таблицу 1.5). В кристаллах SrF₂ параметр $k-1=-0.2$. Он имеет минимальное абсолютное значение из приведенных в таблице, а коэффициент $n_{FI}^{\{1\{100\}} = 52$ максимален, тогда как в PbS параметр $k-1=-0.466$ имеет максимальное по абсолютной величине значение, а коэффициент $n_{FI}^{\{1\{100\}} = 2.51$ минимален из кристаллов второй группы (см. таблицу 1.5). Для области дефокусировки средняя плотность состояний $n_{DI}^{\{1\{100\}}$ для поперечных мод будет меньше, чем N_{Iso} в отношении

$$n_{DI}^{\{1\{100\}} = N_D^{\{1\{100\}} / N_{Iso} = (\pi - 4\theta_4^{\{1\{100\}}) / (\pi - 4\theta_3^{\{1\{100\}}). \quad (1.62)$$

Из выражения (1.62) для кристаллов Ge и Si получим $n_{DI}^{\{1\{100\}} = 0.38$ и 0.43, соответственно. Из формул (1.61) и (1.62) получим отношения средних плотностей состояний для областей фокусировки и дефокусировки фононов, которые характеризуют анизотропию плотности состояний

$$n_{FD}^{\{1\{100\}} = N_F^{\{1\{100\}} / N_D^{\{1\{100\}} = \theta_4^{\{1\{100\}} (\pi - 4\theta_3^{\{1\{100\}}) / [(\pi - 4\theta_4^{\{1\{100\}}) \theta_3^{\{1\{100\}}]}. \quad (1.63)$$

Оценки показывают, что максимальная анизотропия плотности фононных состояний для моды t_2 в кристаллах первой группы имеет

место в Si ($n_{FD}^{t2\{100\}} = 9.9$), а минимальная - в Ge ($n_{FD}^{t2\{100\}} = 8.7$) (см. таблицу 1.5). В этом случае также нет прямой корреляции между величиной

Таблица 1.5

Рассчитанные значения углов $\theta_i^{t2\{100\}}$ и средняя плотность состояний в областях фокусировки и дефокусировки в плоскости $\{100\}$ для моды t_2 в кристаллах первого типа и моды t_1 в кристаллах второго типа.

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

параметра анизотропии $k-1$ и значением коэффициента $n_{FD}^{t2\{100\}}$. Однако, как видно из таблицы 1.5, максимальные значения коэффициента $n_{FD}^{t2\{100\}}$ обусловлены малыми значениями углов $\theta_3^{t2\{100\}}$, характеризующих область фокусировки фононов. Этот эффект проявляется и в кристаллах второй группы (см. таблицу 1.5). Так, например, для кристаллов SrF₂ угол $\theta_3^{t1\{100\}} = 0.17^\circ$ имеет минимальное значение из приведенных в таблице, и коэффициент $n_{FD}^{t1\{100\}}$ аномально велик $n_{FD}^{t1\{100\}} = 64.7$. Следует отметить, что полное число состояний, сконцентрированных в области фокусировки ($2\theta_3^{t1\{100\}}$) для SrF₂ относительно невелико, по сравнению с другими соединениями. Поэтому, как мы увидим далее, эта аномалия не окажет существенного влияния на релаксационные характеристики фононов в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Для остальных кристаллов второй группы коэффициент $n_{FD}^{t1\{100\}}$ изменяется от значения 8.9 для PbS до 10.5 для CaF₂.

Алмаз мы исключили из таблицы 1.5, так как параметр анизотропии для него оказался слишком малым, чтобы обеспечить участки отрицательной кривизны на изоэнергетических поверхностях для квазипоперечных акустических мод. Именно этот случай (наличие участков отрицательной кривизны на изоэнергетических поверхностях акустических мод) представляет определенные трудности при анализе фокусировки с помощью «фактора усиления» (см. например, [18, 72-75]). Связано это с тем, что, во-первых, «фактор усиления» обращается в бесконечность в точках нулевой кривизны, а во-вторых, в областях с отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности зависимости групповых скоростей от направления волнового вектора становятся неоднозначной функцией углов (см. рис. 1.12). В отличие от этого подхода ниже мы даем простой и наглядный метод, позволяющий оценить среднюю плотность состояний для областей фокусировки и дефокусировки фононов.

Следует отметить, что ситуация с фокусировкой поперечных фононов, волновые вектора которых лежат в диагональной плоскости, является более сложной, чем в плоскости грани куба. Дело в том, что в рассматриваемом случае разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды является физически некорректным (см. [44], а также раздел 1.1). В данном случае одна из поперечных мод с вектором поляризации, лежащим в диагональной плоскости, является смешанной поперечно-продольной модой, а вторая – с вектором поляризации, перпендикулярным этой плоскости, является чистой модой. Первая мода в области углов $\theta_{[111]} < \theta < \pi - \theta_{[111]}$ и $\pi + \theta_{[111]} < \theta < 2\pi - \theta_{[111]}$ является медленной, а в интервале углов $-\theta_{[111]} < \theta < \theta_{[111]}$ и $\pi - \theta_{[111]} < \theta < \pi + \theta_{[111]}$ она является быстрой модой. Для обоих поперечных мод имеют место участки с отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности, отмеченные на рисунках 1.14 красным цветом (жирной линией).

Однако для плоскостей близких к $\{110\}$, когда $\varphi = \pi/4 \pm \delta$ (где $\delta \ll 1$), вместо пересечения быстрых и медленных ветвей возникает их разделение с резким изменением векторов поляризации в окрестности этого перехода (см. раздел 1.1 и рис. 1.15). Как видно из рисунка 1.15, при $\delta = \pm 0.1$ в спектре поперечных фононов для направлений в окрестности $[111]$ снимается вырождение ветвей, и они разделяются на быструю и медленную поперечную моды. Поскольку при расчете кинетических характеристик фононов интегрирование проводится по всем

направлениям волновых векторов фононов, то наличие особенности в изолированной точке ($\theta_{[111]}$ и $\varphi \equiv \pi/4$) не дает вклада в релаксационные характеристики фононного газа. Поэтому далее мы будем считать, что для всех сечений разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды является правомерным.

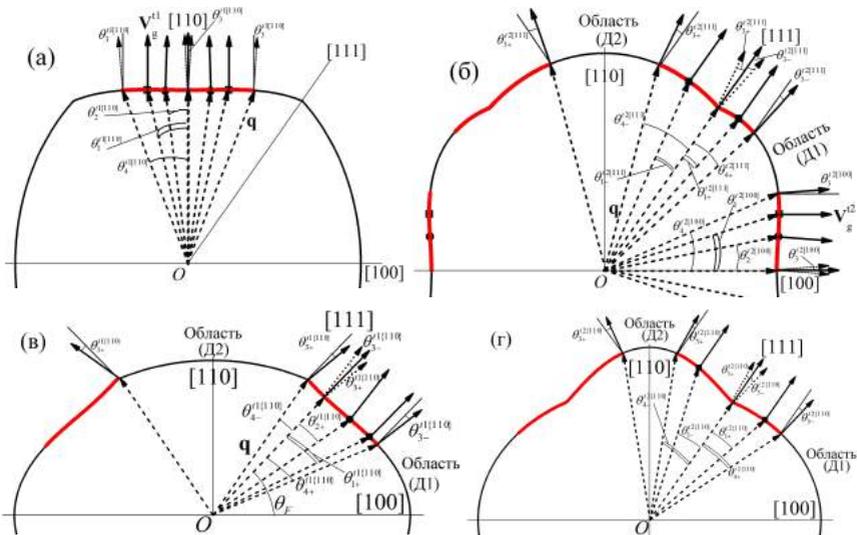


Рис. 1.14. Схема, иллюстрирующая фокусировку быстрых (а),(в) и медленных (б),(г) поперечных мод в кристаллах Si (а), (б) и CaF_2 (в), (г) для сечений изоэнергетической поверхности плоскостью близкой к диагональной ($\varphi = \pi/4 \pm \delta$, где $\delta \rightarrow 0$). Стрелками изображены волновые вектора внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её. Д1 и Д2 – области дефокусировки фононов

В плоскости $\varphi = \pi/4 \pm \delta$ ($\delta \ll 1$) на изоэнергетических поверхностях медленной поперечной моды в окрестности направления $[111]$ для кристаллов обоих типов имеются области с отрицательной кривизной. При увеличении параметра δ область поверхности с отрицательной кривизной сначала уменьшается, а при больших значениях δ изоэнергетическая поверхность становится полностью выпуклой (см. рис. 1.16). Так, например, для кристалла второго типа CaF_2 эта ситуация имеет место при $\delta = 3\pi/16$. При $\delta = \pi/4$ мы переходим в плоскость грани куба, для которой спектр медленной поперечной моды становится

изотропным (см. рис. 1.16). Такая же ситуация имеет место для кристаллов первого типа таких, как Si, MgO, GaN и т. д. (см. рис. 1.14 б,г). Для них в окрестности направления $[111]$ имеются области с отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности, которые приводят к появлению локальных максимумов фокусировки в окрестности направлений $[111]$ для моды t_2 (см. рис. 1.14 б,г).

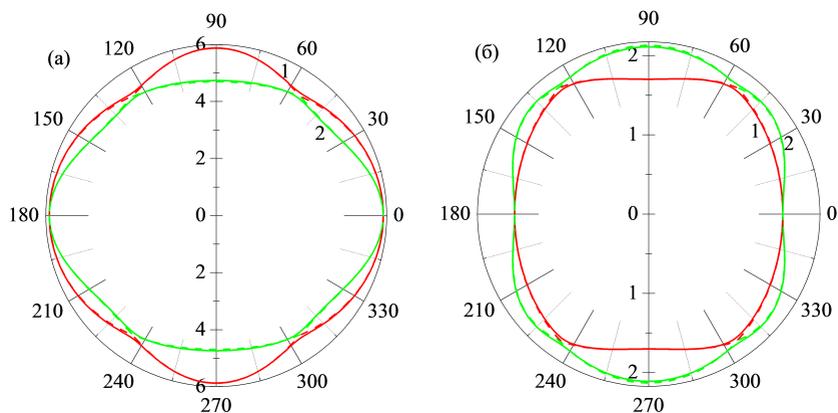


Рис. 1.15. Угловые зависимости фазовых скоростей (а), нормированных на 10^5 см/с, и изоэнергетических поверхностей (б) в кристаллах Si для волновых векторов в плоскостях близких к диагональной: $\varphi = \pi/4 + 0.1$ – сплошные кривые и $\varphi = \pi/4 + 0.01$ – штриховые кривые. Кривые 1 и 2 – для квазипоперечных мод t_1 и t_2 , соответственно

В кристаллах первого типа для волновых векторов в диагональной плоскости быстрая поперечная мода фокусируется в направлении $[110]$, а медленная поперечная мода – в направлениях $[100]$ и $[111]$ (см. рис. 1.14). Из рисунка 1.14 видно, что фокусировка фононов моды t_1 в кристаллах второго типа для волновых векторов в плоскости $\{110\}$ происходит иначе, чем в кристаллах первого типа. Во-первых, в рассматриваемом случае минимум на изоэнергетической поверхности и направление фокусировки фононов быстрой моды t_1 не совпадает с симметричным направлением. Во-вторых, область отрицательной кривизны на изоэнергетической поверхности становится несимметричной относительно точки минимума (см. таблицу 1.7 и рис. 1.14в). Так, например, для CaF_2 точка минимума расположена при $\theta_F = 47.6^\circ$.

Определим средние значения плотности состояний в кристаллах первой группы для областей фокусировки и дефокусировки моды t_2 . Отметим, что в диагональной плоскости мода t_2 , в отличие от плоскости грани куба, имеет по две области фокусировки и дефокусировки фононов (см. рис. 1.14б). В первой области фокусировки коэффициент $n_{FI[100]}^{t_2\{110\}}$ определяется выражением (1.63), а для второй области:

$$n_{FI[111]}^{t_2\{110\}} = (\theta_{4[111]+}^{t_2\{110\}} + \theta_{4[111]-}^{t_2\{110\}}) / (\theta_{3[111]+}^{t_2\{110\}} + \theta_{3[111]-}^{t_2\{110\}}) \quad (1.66)$$

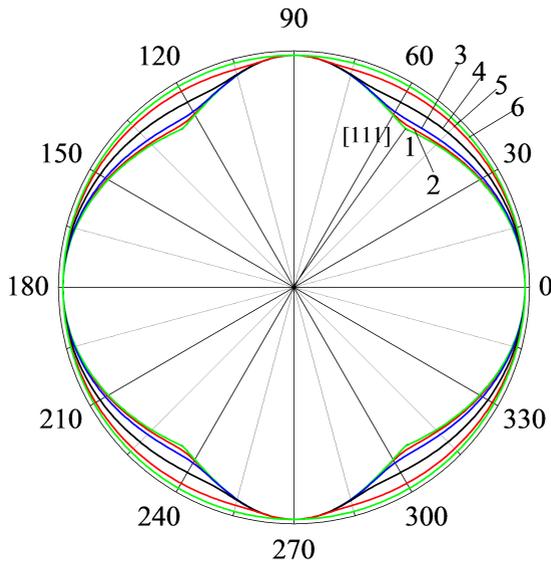


Рис. 1.16. Угловые зависимости изоэнергетических поверхностей в кристаллах CaF_2 для медленной поперечной моды в плоскостях $\varphi = \pi/4 + \delta$: $\delta = 0.01$ – кривая 1, $\delta = 0.1$ – кривая 2, $\varphi = \pi/16$ – кривая 3, $\varphi = 2\pi/16$ – кривая 4, $\varphi = 3\pi/16$ – кривая 5, $\varphi = \pi/4$ – кривая 6

В кристаллах Si , согласно данным таблицы 1.6, имеем: (1) $n_{FI[100]}^{t_2\{110\}} = 6.33$ и (2) $n_{FI[111]}^{t_2\{110\}} = 1.28$. Области дефокусировки (Д1 и Д2) в соответствии с рисунками 1.14б определяются углами: (1) $\theta_3^{t_2[100]} < \theta_g < \theta_{[111]} - \theta_3^{t_2[111]}$ и (2) $\pi - (\theta_{[111]} + \theta_{3+}^{t_2[111]}) < \theta_g < \theta_{[111]} + \theta_{3+}^{t_2[111]}$. Тогда для средних плотностей состояний в первой и второй областях относительно изотропной среды получим:

$$n_{DI(1)}^{t2\{110\}} = N_{DI(1)}^{t2\{110\}} / N_{Iso} = (\theta_{[111]} - \theta_{4+}^{t2[111]} - \theta_4^{t2[100]}) / (\theta_{[111]} - \theta_{3-}^{t2[111]} - \theta_3^{t2[100]}) . (1.67)$$

$$n_{DI(2)}^{t1\{110\}} = N_{DI(2)}^{t1\{110\}} / N_{Iso} = (\pi - 2(\theta_{[111]} + \theta_{4-}^{t2[111]})) / (\pi - 2(\theta_{[111]} + \theta_{3+}^{t2[111]})) . (1.68)$$

Воспользуемся таблицей 1.6 и для Si найдем: (1) $n_{DI(1)}^{t2\{110\}} = 0.40$, (2) $n_{DI(2)}^{t1\{110\}} = 0.66$. В результате для отношения средних плотностей состояний в областях фокусировки и дефокусировки фононов в кристаллах Si получим: (1) $n_{FD[100]}^{t2\{110\}} = 15.8$ и (2) $n_{FD[111]}^{t2\{110\}} = 1.9$. Приведем оценки средних плотностей состояний для областей фокусировки и дефокуси-

Таблица 1.6

Углы $\theta_i^{\lambda\{110\}}$, характеризующие фокусировку быстрых и медленных поперечных мод для волновых векторов в диагональной плоскости ($\varphi = \pi / 4$).

| Кристалл (мода, напр-е фокуси- ровки) | $\theta_1^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_2^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_3^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_4^{\lambda\{110\}}$ | $n_{FI}^{\lambda\{110\}}$ | $n_{DI}^{\lambda\{110\}}$ | | | | |
|---|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|----------------------|-------------------------|
| GaN (t_1 , [110]) | 28.0° | 14.4° | 8.1° | 33.3° | 4.09 | 0.69 | | | | |
| GaN (t_2 , [100]) | 27.5° | 12.3° | 14.7° | 33.8° | 2.30 | 0.37 (1) | | | | |
| Si (t_1 , [110]) | 13.4° | 7.5° | 0.86° | 15.7° | 18.2 | 0.83 | | | | |
| Si (t_2 , [100]) | 18.1° | 9.6° | 3.4° | 21.7° | 6.33 | 0.40 (1) | | | | |
| MgO (t_1 , [110]) | 7.9° | 4.5° | 0.1° | 8.75° | 88.2 | 0.90 | | | | |
| MgO (t_2 , [100]) | 16.0° | 8.6° | 2.3° | 18.7° | 8.15 | 0.46 (1) | | | | |
| | $\theta_{1+}^{t2\{110\}}$ | $\theta_{1-}^{t2\{110\}}$ | $\theta_{2+}^{t2\{110\}}$ | $\theta_{2-}^{t2\{110\}}$ | $\theta_{3+}^{t2\{110\}}$ | $\theta_{3-}^{t2\{110\}}$ | $\theta_{4+}^{t2\{110\}}$ | $\theta_{4-}^{t2\{110\}}$ | $n_{FI}^{t2\{110\}}$ | $n_{DI(2)}^{t2\{110\}}$ |
| GaN (t_2 , [111]) | 8.8° | 18.2° | 0° | 0° | 23.3° | 23.3° | 14.8° | 30.0° | 0.96 | 0.44 |
| Si (t_2 , [111]) | 6.4° | 10.9° | 0° | 0° | 12.6° | 12.6° | 12.0° | 20.4° | 1.28 | 0.66 |
| MgO (t_2 , [111]) | 5.9° | 9.8° | 0° | 0° | 11.1° | 11.1° | 11.3° | 18.4° | 1.34 | 0.70 |

ровки моды t_2 для кристаллов второй группы на примере CaF_2 . В диагональной плоскости мода t_2 имеет одну область фокусировки в окрестности направления $[111]$ и две области дефокусировки фононов (см. области Д1 и Д2 на рис. 1.14Г). Относительная плотность состояний в области фокусировки $n_{FI[111]}^{\{110\}t_2}$ для кристалла CaF_2 определяется формулой (1.66). Для областей дефокусировки несложно получить:

$$(Д1) \quad n_{DI(1)}^{\{110\}t_2} = N_{DI(1)}^{\{110\}t_2} / N_{Iso} = (\theta_{[111]} - \theta_{4+}^{\{110\}t_2}) / (\theta_{[111]} - \theta_{3-}^{\{110\}t_2}), \quad (1.69)$$

$$(Д2) \quad n_{DI(2)}^{\{110\}t_2} = N_{DI(2)}^{\{110\}t_2} / N_{Iso} = (\pi - 2(\theta_{[111]} + \theta_{4-}^{\{110\}t_2})) / (\pi - 2(\theta_{[111]} + \theta_{3+}^{\{110\}t_2})). \quad (1.70)$$

Воспользовавшись таблицей 1.7, для кристалла CaF_2 получим: $n_{FI[111]}^{\{110\}t_2} = 1.99$; $n_{DI(1)}^{\{110\}t_2} = 0.77$, $n_{DI(2)}^{\{110\}t_2} = 0.39$. В результате для отношений средних плотностей состояний в областях фокусировки и дефокусировки фононов в кристаллах CaF_2 получим: (1) $n_{FD(1)}^{\{110\}t_2} = 2.6$ и (2) $n_{FD(2)}^{\{110\}t_2} = 5.1$. Проанализируем угловые зависимости средних плотностей состояний быстрой поперечной моды t_1 в кристаллах второй группы для волновых векторов в диагональной плоскости. В этой

Таблица 1.7

Углы $\theta_i^{\lambda\{110\}}$, характеризующие фокусировку быстрых и медленных поперечных мод для волновых векторов в диагональной плоскости для кристалла CaF_2 . $n_{DI(1),(2)}^{\lambda\{110\}}$ – плотность состояний в направлениях $[100]$ (1) и $[110]$ (2).

| мода, напр-е фокуси- ровки | $\theta_{1+}^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_{1-}^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_{2+}^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_{2-}^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_{3+}^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_{3-}^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_{4+}^{\lambda\{110\}}$ | $\theta_{4-}^{\lambda\{110\}}$ | $n_{FI}^{\lambda\{110\}}$ | $n_{DI(1)}^{\lambda\{110\}}$ | $n_{DI(2)}^{\lambda\{110\}}$ |
|-------------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|---------------------------|------------------------------|------------------------------|
| t_1 , $\theta_F = 47.6^\circ$ | 20.5° | 8.0° | 11.7° | 0° | 3.3° | 3.7° | 23.4° | 8.2° | 4.67 | 0.55 | 0.87 |
| t_2 , $[111]$ | 14.1° | 20.2° | 0° | 0° | 12.0° | 12.0° | 21.7° | 26.1° | 1.99 | 0.77 | 0.39 |

плоскости мода t_1 фокусируется в направлениях близких к $[111]$ (при $\theta = \theta_F$). Она имеет две области дефокусировки: область Д1 на рис. 1.14В – в интервале углов $-(\theta_F - \theta_{3-}^{\{110\}t_1}) < \theta < \theta_F - \theta_{3-}^{\{110\}t_1}$ и область Д2 на рис. 1.14В – в интервале углов $\theta_F + \theta_{3+}^{\{110\}t_1} < \theta < \pi - \theta_F - \theta_{3+}^{\{110\}t_1}$. В области

фокусировки моды t_1 для кристалла CaF_2 имеем:

$$n_{FI}^{t_1\{110\}} = (\theta_{4+}^{t_1\{110\}} + \theta_{4-}^{t_1\{110\}}) / (\theta_{3+}^{t_1\{110\}} + \theta_{3-}^{t_1\{110\}}) = 4.67. \quad (1.71)$$

Для областей дефокусировки несложно получить:

$$(D1) \quad n_{DI(1)}^{t_1\{110\}} = N_{DI(1)}^{t_1\{110\}} / N_{Iso} = (\theta_F - \theta_{4+}^{t_1\{110\}}) / (\theta_F - \theta_{3-}^{t_1\{110\}}). \quad (1.72)$$

$$(D2) \quad n_{DI(2)}^{t_1\{110\}} = N_{DI(2)}^{t_1\{110\}} / N_{Iso} = (\pi - 2(\theta_F + \theta_{4-}^{t_1\{110\}})) / (\pi - 2(\theta_F + \theta_{3+}^{t_1\{110\}})). \quad (1.73)$$

Согласно формулам (1.72) и (1.73) для кристалла CaF_2 получим: $n_{DI(1)}^{t_1\{110\}} = 0.55$, $n_{DI(2)}^{t_1\{110\}} = 0.87$. В результате для отношения средних плотностей состояний в областях фокусировки и дефокусировки фононов в кристаллах CaF_2 получим: (1) $n_{FD(1)}^{t_1\{110\}} = 8.5$ и (2) $n_{FD(2)}^{t_1\{110\}} = 5.4$.

Из таблиц 1.6 и 1.7 видно, что в кристаллах обоих типов для медленной поперечной моды в направлении $[111]$ выполняется равенство: $\theta_3^{t_2\{111\}} \equiv \theta_{3-}^{t_2\{111\}} = \theta_{3+}^{t_2\{111\}}$. Это не удивительно, поскольку в направлении $[111]$ происходит внутренняя коническая рефракция поперечных фононов (см. [76-78]). В работе [76] показано, что в кубических кристаллах в окрестности направления $[111]$ фононы медленной поперечной моды распространяются в конусе с углом раскрытия $2\theta_3^{t_2\{111\}}$. Согласно [76], угол $\theta_3^{t_2\{111\}}$ может быть выражен через модули упругости второго порядка следующим образом:

$$\theta_3^{t_2\{111\}} = \arctg \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(k-1)(c_{11} - c_{44})}{(c_{11} - c_{12} + c_{44})} \right|. \quad (1.74)$$

Для волновых векторов, лежащих в плоскостях, близких к диагональной плоскости $\varphi = \pi/4 \pm \delta$ (где $\delta \ll 1$), кривизна изоэнергетической поверхности, а также характеристические углы $\theta_i^\lambda(\delta)$ будут функциями угла δ (см. рис. 1.14-1.16). Схема определения углов $\theta_i^{t_2\{110\}}(\delta)$ при $\delta \ll 1$ в диагональной плоскости изображена на рисунке 1.17, а их величины представлены в таблице 1.8. В случае несимметричных областей отрицательной кривизны для мод t_1 и t_2 относительная плотность состояний в области фокусировки фононов будет определяться углами $\theta_{4\pm}^\lambda(\delta)$ и $\theta_{3\pm}^\lambda(\delta)$ в соответствии с выражением:

$$n_{FI}^{\lambda\{110\}} = N_F^{\lambda\{110\}} / N_{Iso} = (\theta_{4+}^\lambda(\delta) + \theta_{4-}^\lambda(\delta)) / (\theta_{3+}^\lambda(\delta) + \theta_{3-}^\lambda(\delta)). \quad (1.75)$$

Для оценки изменения плотности фоновых состояний для волновых векторов в плоскостях, близких к диагональной, определим зависимости углов $\theta_{3\pm}^{2[111]}(\delta)$ и $\theta_{4\pm}^{2[111]}(\delta)$ при малых значениях δ (см. таблицу 1.8). Поскольку функции $\theta_g^2(\theta, \pi/4 \pm \delta)$ являются четными функциями параметра δ , то аппроксимируем зависимости $\theta_{3\pm}^{2[111]}(\delta)$ и $\theta_{4\pm}^{2[111]}(\delta)$ биквадратичными функциями типа:

$$\theta_{3\pm}^{2[111]}(\delta) = a^\pm (\delta)^4 + b^\pm (\delta)^2 + c^\pm. \quad (1.76)$$

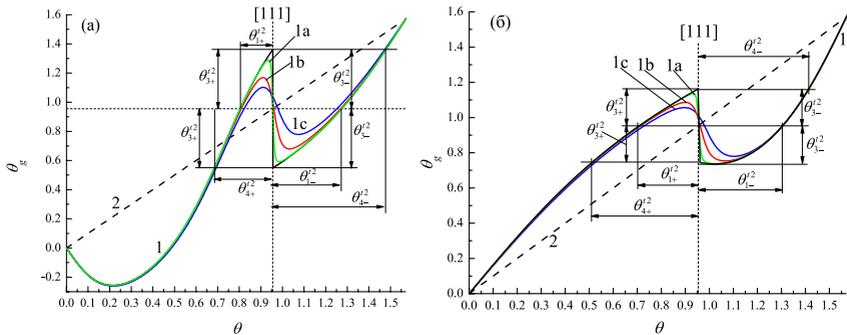


Рис. 1.17. Схема определения углов $\theta_{1\pm}^{i2}(\delta)$, $\theta_{3\pm}^{i2}(\delta)$ и $\theta_{4\pm}^{i2}(\delta)$ для медленной поперечной моды в плоскостях близких к диагональной ($\varphi = \pi/4 \pm \delta$) в кристаллах (а) GaN и (б) CaF₂: кривые 1 – функция $\theta_g^{i2}(\theta, \pi/4)$, кривые 1а – функция $\theta_g^{i2}(\theta, \pi/4 \pm 0.01)$, кривые 1б – функция $\theta_g^{i2}(\theta, \pi/4 \pm 0.05)$, кривые 1с – функция $\theta_g^{i2}(\theta, \pi/4 \pm 0.1)$. Кривые 2 – функция $\theta_g^{i2}(\theta) = \theta$ (случай изотропной среды)

Таблица 1.8.

Значения углов $\theta_{3\pm}^{2[111]}(\delta)$ и $\theta_{4\pm}^{2[111]}(\delta)$ для параметров $\delta = 0.05$ и 0.1 , характеризующих фокусировку медленных поперечных мод в окрестности направления [111].

| Кристалл | δ | $\theta_{3+}^{2[111]}(\delta)$ | $\theta_{3-}^{2[111]}(\delta)$ | $\theta_{4+}^{2[111]}(\delta)$ | $\theta_{4-}^{2[111]}(\delta)$ |
|------------------|----------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| GaN | 0.05 | 12.2° | 15.8° | 12.3° | 26.7° |
| | 0.1 | 7.3° | 11.2° | 10.9° | 23.1° |
| Si | 0.05 | 5.1° | 6.3° | 8.3° | 15.7° |
| | 0.1 | 2.1° | 3.4° | 6.7° | 12.2° |
| MgO | 0.05 | 5.1° | 4.2° | 7.8° | 13.8° |
| | 0.1 | 3.4° | 2.6° | 6.8° | 11.3° |
| CaF ₂ | 0.05 | 7.5° | 11.6° | 20.9° | 26.2° |
| | 0.1 | 4.9° | 10.9° | 17.9° | 25.4° |

Определим углы $\theta_{3\pm}^{t2\{111\}}(\delta)$ для значений параметров $\delta = 0^+$, 0.05 и 0.1 и найдем неизвестные коэффициенты a^\pm , b^\pm и c^\pm , например, для CaF_2 :

1) для $\theta_{3+}^{t2\{111\}}$: $a^+ = 2537$, $b^+ = -37.76$, $c^+ = 0.21$;

2) для $\theta_{3-}^{t2\{111\}}$: $a^- = 116.4$, $b^- = -3.08$, $c^- = 0.21$.

Усредним функцию $\theta_3^{t2\{111\}}(\delta)$ по углу δ в интервале $[0, \Delta]$ следующим образом:

$$\langle \theta_3^{t2\{111\}}(\delta) \rangle = \frac{1}{\Delta} \int_0^\Delta d\delta \theta_3^{t2\{111\}}(\delta). \quad (1.77)$$

Возьмем область усреднения $\Delta=0.1$ рад (5.7°) и для CaF_2 получим: $\langle \theta_{3+}^{t2\{111\}} \rangle = 7.7^\circ$ и $\langle \theta_{3-}^{t2\{111\}} \rangle = 11.5^\circ$. Аналогично проводим усреднение углов $\theta_{4\pm}^{t2\{111\}}$. Средние значения углов $\langle \theta_i^{t2\{110\}} \rangle$ приведены в таблице 1.9.

Рассмотрим далее и сравним угловые зависимости средних плотностей фононных состояний в кристаллах первого (Ge, Si, GaN) и второго (CaF_2 , PbS) типов для волновых векторов в плоскости грани куба.

Таблица 1.9

Средние значения углов $\langle \theta_{3,4}^{t2\{110\}} \rangle$, характеризующих фокусировку медленных поперечных мод в окрестности направления $[111]$, а также значения плотностей состояний в областях фокусировки $\langle n_{FI}^{t2\{110\}} \rangle$ и дефокусировки фононов $\langle n_{D(1),(2)}^{t2\{110\}} \rangle$ и отношения средних плотностей состояний $\langle n_{FD(1),(2)}^{t2\{110\}} \rangle$.

| Кристалл | $\langle \theta_{3+}^{t2\{111\}} \rangle$ | $\langle \theta_{3-}^{t2\{111\}} \rangle$ | $\langle \theta_{4+}^{t2\{111\}} \rangle$ | $\langle \theta_{4-}^{t2\{111\}} \rangle$ | $\langle n_{FI}^{t2\{110\}} \rangle$ | $\langle n_{D(1)}^{t2\{110\}} \rangle$ | $\langle n_{D(2)}^{t2\{110\}} \rangle$ | $\langle n_{FD(1)}^{t2\{110\}} \rangle$ | $\langle n_{FD(2)}^{t2\{110\}} \rangle$ |
|----------------|---|---|---|---|--------------------------------------|--|--|---|---|
| GaN | 12.9° | 16.1° | 12.5° | 26.6° | 1.35 | 0.15 | 0.39 | 8.95 | 3.5 |
| Si | 5.6° | 6.7° | 8.5° | 15.8° | 1.97 | 0.43 | 0.66 | 4.63 | 3.0 |
| MgO | 5.6° | 4.9° | 8.1° | 14.0° | 2.11 | 0.47 | 0.72 | 4.49 | 2.9 |
| CaF_2 | 7.7° | 11.5° | 20.5° | 26.1° | 2.42 | 0.79 | 0.33 | 3.06 | 7.3 |

Как видно из рисунка 1.18а, области максимумов плотности состояний в кристаллах первого типа (Ge, Si, GaN) соответствуют минимумам в кристаллах второго типа (CaF_2 , PbS). Это обусловлено тем, что направлениям фокусировки в кристаллах первого типа соответствуют направлениям дефокусировки в кристаллах второго типа (см. рис. 1.18а). Из приведенных на рисунке 1.18а зависимостей для кристаллов первого

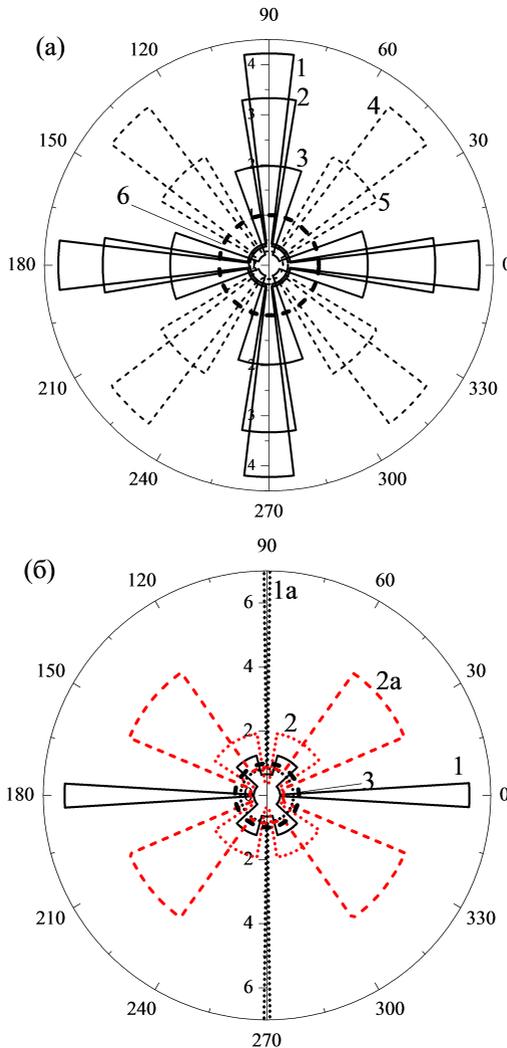


Рис. 1.18. (а) Угловые зависимости средних плотностей фоновых состояний в плоскости $\{100\}$ для моды t_2 в кристаллах Si (1), Ge (2), GaN (3) и быстрой моды t_1 в кристаллах CaF₂ (4) и PbS (5). Кривая 6 – плотность фоновых состояний в модели изотропной среды. (б) Угловые зависимости средних плотностей фоновых состояний в плоскости $\{110\}$ ($\varphi = \pi/4$) в кристаллах Si (1, 1a) и CaF₂ (2, 2a) для медленных (кривые 1 и 2) и быстрых (кривые 1a и 2a) поперечных фононов. Кривая 3 – плотность фоновых состояний для модели изотропной среды

типа максимальные значения плотности состояний достигает для кристаллов Si, которые имеют минимальное значение параметра анизотропии и угла $2\theta_3^{t_2\{100\}}$, определяющего область фокусировки фононов, а минимальные - для кристаллов GaN, которые имеют максимальное значение параметра анизотропии и угла $2\theta_3^{t_2\{100\}}$, определяющего область фокусировки фононов.

Поскольку угловые зависимости плотностей фононных состояний для волновых векторов в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) имеют более сложный вид, то мы приведем их зависимости только для кристаллов Si и CaF₂ (см. рис. 1.18б). Для кристалла Si в области фокусировки быстрой поперечной моды в направлении [110] угол $\theta_3^{t_1} < \theta_4^{t_1}$ (см. табл. 1.6), поэтому максимум плотности состояний для этой моды значительно превосходит плотность состояний в изотропной среде ($n_{FI}^{t_1\{110\}} = 18.2$) и максимумы плотности состояний медленной поперечной моды, которая фокусируется в направлениях [100] и [111] (см. табл. 1.6 и рис. 1.18б, кривые 1 и 1а). Причем, максимум плотности состояний для моды t_2 в направлении [001] превосходит максимум в направлении [111] почти в 5 раз. В кристаллах CaF₂ в направлении $\theta = \theta_F = 47.6^\circ$ фокусируются фононы быстрой поперечной моды, а в направлении [111] – фононы медленной поперечной моды. Максимум плотности состояний моды t_2 в направлении [111] оказывается в два раза выше максимума, соответствующего быстрой поперечной моде (см. рис. 1.18б, кривые 2 и 2а). Поскольку области фокусировок этих мод перекрываются, то можно ожидать, что средняя по модам длина свободного пробега в окрестности [111] может заметно возрасти. Таким образом, анализ анизотропии плотностей фононных состояний дал еще одно подтверждение обоснованности разделения кубических кристаллов на два типа в соответствии со знаком параметра анизотропии. Как мы увидим далее, резкое изменение плотности фононных состояний при переходе от областей фокусировки к областям дефокусировки приведет к значительному влиянию на теплопроводность и длины пробега фононов рассматриваемых кристаллов.

Сравним угловые зависимости средних плотностей фононных состояний в кристаллах Si и CaF₂ для моды t_2 в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) и усредненных по волновым векторам, лежащих в плоскостях, близких к диагональной плоскости $\varphi = \pi/4 \pm \delta$ (где $\delta \leq 0.1$). Как следует из рисунков 1.18 (б) и 1.19 (а) для кристаллов Si плотность

состояний моды t_2 в направлении $[111]$ при $\varphi \equiv \pi/4$ $n_{FI[111]}^{t_2\{110\}} = 1.28$. Однако после усреднения по плоскостям близким к диагональной плоскости она увеличивается в 1.5 раза: $\langle n_{FI[111]}^{t_2\{110\}} \rangle = 1.97$ (см. рис. 1.19а). Меньший по величине эффект наблюдается для кристалла второго типа CaF_2 : при $\varphi \equiv \pi/4$ величина $n_{FI[111]}^{t_2\{110\}} = 1.95$, а после усреднения по углу δ максимум плотности состояний увеличивается в 1.2 раза: $n_{FI[111]}^{t_2\{110\}} = 2.42$ (см. рис. 1.19б). Этот эффект можно объяснить следующим образом.

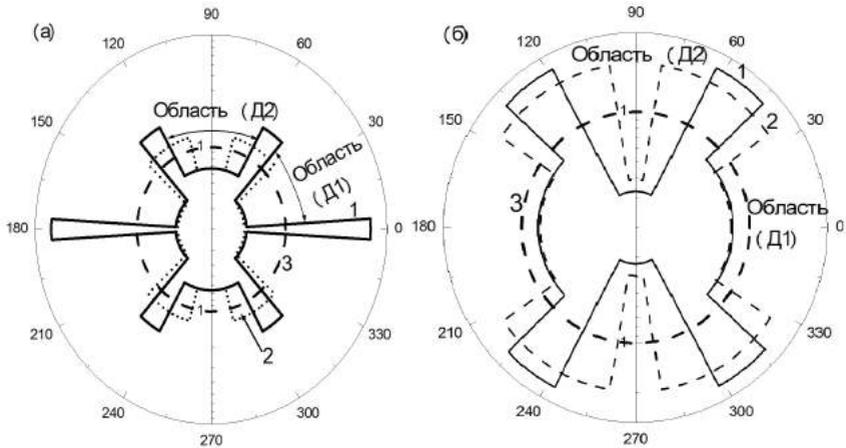


Рис. 1.19. Угловые зависимости плотностей фоновых состояний медленных поперечных фононов в кристаллах Si (а) и CaF_2 (б) для волновых векторов в диагональной плоскости. Кривые 1 – плотность состояний медленных поперечных фононов для усредненных углов $\langle \theta_{3\pm}^{t_2\{111\}} \rangle$ и $\langle \theta_{4\pm}^{t_2\{111\}} \rangle$ (см. таблицу 1.9).

Кривые 2 – плотность состояний медленных поперечных фононов для углов $\theta_{3\pm}^{t_2\{111\}}$ и $\theta_{4\pm}^{t_2\{111\}}$, определенных при $\varphi = \pi/4$ (см. таблицы 1.6 и 1.7).

Кривая 3 – плотность фоновых состояний для модели изотропной среды.

Указаны области дефокусировки фононов (D1) и (D2), соответствующие рисунку 1.14

С увеличением отклонения δ от диагональной плоскости кривизна вогнутого участка изоэнергетической поверхности в окрестности направления $[111]$ уменьшается. В результате он становится более плоским, при этом углы $\theta_{3\pm}^{t_2\{111\}}(\delta)$, определяющие области фокусировки фононов, уменьшаются: после усреднения угол $\langle \theta_{3\pm}^{t_2\{111\}}(\delta) \rangle$ становится меньше, чем $\theta_{3\pm}^{t_2\{111\}}(\pi/4)$ (см. рис. 1.16 и таблицы 1.6-1.8). Поскольку угол $\theta_{4\pm}^{t_2\{111\}}(\delta)$ с увеличением δ меняется слабо, то усредненные зна-

чения плотности состояния $\langle n_{FI[111]}^{r2\{110\}}(\delta) \rangle$ оказываются больше, чем определенные при $\varphi \equiv \pi/4$. Усредненные значения $\langle n_{FI[111]}^{r2\{110\}} \rangle$ и $\langle \theta_{3\pm}^{r2\{111\}} \rangle$ будут использованы в четвертой главе при анализе анизотропии теплопроводности и длин свободного пробега фононов в диагональной плоскости.

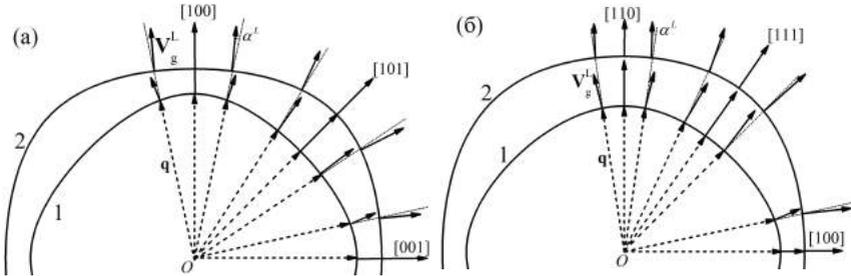


Рис. 1.20. Фокусировки продольных мод в кристаллах Si и CaF₂. Сечения поверхности медленности плоскостями (а) {100} и (б) {110} в кристаллах Si (кривые 1) и CaF₂ (кривые 2) в модели анизотропного континуума. Штриховыми стрелками изображены волновые вектора и сплошными стрелками – соответствующие им групповые скорости фононов

Что касается продольных фононов, то, в отличие от квазипоперечных мод, поверхности медленности для них во всех рассмотренных нами кубических кристаллах не содержат областей с отрицательной кривизной и являются всюду выпуклыми (см. рис. 1.20). Зависимости групповых скоростей для них от направлений волнового вектора фононов является однозначной функцией углов для кристаллов обоих типов. Эффект фокусировки выражен слабее и происходит менее драматическим образом, чем для квазипоперечных мод (см. рис. 1.20). Как видно из рисунков 1.20, анализ влияния фокусировки продольных фононов на направления групповых скоростей, основанный на построении изоэнергетических поверхностей, подтверждает результаты качественного анализа, проведенного в разделе 1.4. Направления фокусировки продольных фононов для кристаллов первого типа становятся направлениями дефокусировки для кристаллов второго типа и наоборот.

1.6. КОЭФФИЦИЕНТ УСИЛЕНИЯ ПОТОКА ФОНОНОВ

При изучении распространения фононных импульсов в упруго анизотропных кристаллах была отмечена резкая анизотропия пространственного распределения потока энергии акустических колебаний различных поляризаций (см. [16-18,45,75,79]). Исследования, проведенные в [16], показали, что амплитуды фононных импульсов в кристаллах LiF и KCl сильно зависят от их поляризаций и направления распространения. Для кристалла LiF в направлении [100] интенсивность потока поперечных фононов оказалась в 100 раз больше чем для продольных фононов, тогда как в кристаллах KCl – наоборот: амплитуда импульса поперечных фононов оказалась в 7 раз меньше, чем для продольных фононов. С другой стороны для кристаллов LiF в направлении [110] интенсивность потока быстрой поперечной моды превосходила значения для продольной и медленной поперечной моды в 10 и 20 раз, соответственно. Для количественного описания этих эффектов Марис в работе [17] воспользовался моделью изотропной среды, как системой сравнения, и ввел понятие коэффициента усиления потока фононов A^λ - «enhancement factor», который также известен [18,73,80], как «amplification factor». Согласно [17] коэффициент A^λ определяется как отношение потока фононов данной поляризации λ для выбранного направления волнового вектора к соответствующему потоку в изотропной среде. При первом знакомстве с работами [17,18,45,73-75,79] возникает впечатление, что «фактор усиления» имеет смысл коэффициента усиления плотности состояний фононов для упруго анизотропного кристалла относительно изотропной среды. Однако, как мы увидим далее, дифференциальный характер определения коэффициента A^λ приводит к ряду особенностей, которые затрудняют его использование для интерпретации экспериментальных данных по распространению фононных импульсов в упруго анизотропных кристаллах. А обращение в бесконечность коэффициента A^λ в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности не позволяет сделать количественных оценок изменения плотности фононных состояний в кристаллах за счет эффекта фокусировки фононов.

Несмотря на значительное число работ, посвященных анализу коэффициента усиления [17,18,45,73-75,80-82,84], остались ряд проблем,

решению которых не было уделено должного внимания. Прежде всего не было получено аналитического выражения для коэффициента A^λ в кубических кристаллах. Нами решена эта задача: предложен новый метод расчета коэффициента усиления и получено простое аналитическое выражение для него. Это позволило проанализировать качественные отличия коэффициентов усиления A^λ в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Исследование влияния анизотропии упругой энергии на спектр и вектора поляризации колебательных мод в [44] показало, что все кубические кристаллы в зависимости от знака параметра $k-1$ ($k-1 = (c_{12}+2c_{44}-c_{11})/(c_{11}-c_{44})$, c_{ij} – упругие модули второго порядка) могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной $k-1 > 0$ (Fe, Cu, MgO, InSb, GaAs, GaN, Ge, Si, алмаз, LiF) и отрицательной $k-1 < 0$ (CaF₂, SrF₂ и PbS) анизотропией упругих модулей второго порядка (см. таблицу 1.2, а также [44]). Целью настоящей работы является исследование физических аспектов влияния фокусировки на распространения фоновых импульсов и коэффициенты усиления в монокристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии.

1.6.1. Аналитический расчет коэффициента усиления потока фононов

Определим выражение для коэффициента A^λ согласно [17]. Пусть на одной из граней образца находится источник фононов (нагреватель), а на противоположной грани – детектор фононов. Они соединены вектором \mathbf{R} . В изотропной среде волны, покидающие источник, будут достигать детектора в случае, если их волновые вектора лежат в телесном угле $\delta\Omega_q = \sin\theta d\theta d\varphi$ ((θ, φ) - угловые переменные вектора \mathbf{q}) в окрестности направления \mathbf{R} (см. рис. 1.21а). В случае анизотропной среды волна с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ достигает центра детектора, если направления групповой скорости лежат в телесном угле $\delta\Omega_V$ в окрестности вектора \mathbf{R} , т.е. (см. рис. 1.21б): $\mathbf{V}_g^\lambda \parallel \mathbf{R}$. Из рисунков 1.22 видно, что этому условию для поперечных мод может удовлетворять не одна волна, а по крайней мере, две или три волны в направлениях волновых векторов, соответствующих областям с отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности. В работе [17] показано, что коэффициент усиления $A^\lambda(\theta, \varphi)$, характеризующий отличие потоков фо-

нонов в кристалле и изотропной среде, может быть определен через отношение телесных углов для волновых векторов и групповых скоростей:

$$A^\lambda(\theta, \varphi) = \delta\Omega_q / \delta\Omega_V^\lambda. \quad (1.78)$$

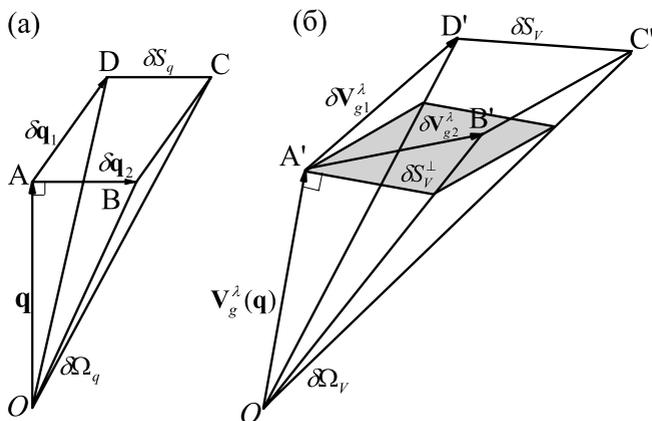


Рис. 1.21. Схематичное изображение телесных углов: (а) – $\delta\Omega_q$ в \mathbf{q} -пространстве и (б) – $\delta\Omega_V^\lambda$ в пространстве групповых скоростей

Поскольку распределение волновых векторов, в отличие от групповых скоростей, изотропно в кристалле, то плотность потока фононов будет увеличиваться или уменьшаться на величину $A^\lambda(\theta, \varphi)$ по отношению к изотропной среде. Поэтому задача сводится к вычислению отношения телесного угла в \mathbf{q} -пространстве к телесному углу в пространстве групповых скоростей. В \mathbf{q} -пространстве из точки O под углом $\delta\Omega_q$ виден параллелограмм ABCD (см. рис. 1.21а). Вектора $\mathbf{q} = q\mathbf{n}$, $\delta\mathbf{q}_1 = q\mathbf{n}_1$ и $\delta\mathbf{q}_2 = q\mathbf{n}_2$ образуют тройку взаимно ортогональных векторов [40]. Тогда для изотропной среды имеем

$$\delta\Omega_q = (\delta q / q)^2. \quad (1.79)$$

Соответствующий телесный угол для тех же вариаций волновых векторов ($\delta\mathbf{q}_1$ и $\delta\mathbf{q}_2$) в пространстве групповых скоростей $\delta\Omega_V^\lambda$ есть угол, под которым виден параллелограмм A'B'C'D' (см. рис. 1.21б), где

$$\begin{aligned}\delta V_{gli}^\lambda &= V_{gi}^\lambda(\mathbf{q} + \delta \mathbf{q}_1) - V_{gi}^\lambda(\mathbf{q}) = \partial V_{gi}^\lambda / \partial \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{q}_1, \\ \delta V_{g2i}^\lambda &= V_{gi}^\lambda(\mathbf{q} + \delta \mathbf{q}_2) - V_{gi}^\lambda(\mathbf{q}) = \partial V_{gi}^\lambda / \partial \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{q}_2,\end{aligned}\quad (1.80)$$

где V_{gi}^λ – i -ая компонента групповой скорости в ортогональной системе координат.

Тогда телесный угол $\delta \Omega_V$ в пространстве групповых скоростей примет вид [17]:

$$\delta \Omega_V = \delta S_V^\perp / (V_g^\lambda)^2 = \left| \left[\left(\partial \mathbf{V}_{g1}^\lambda \times \partial \mathbf{V}_{g2}^\lambda \right) \cdot \mathbf{V}_g^\lambda \right] / (V_g^\lambda)^3 \right|. \quad (1.81)$$

А коэффициент усиления $A^\lambda(\theta, \varphi)$ был представлен в виде [2]:

$$(A^\lambda(\theta, \varphi))^{-1} = \frac{\delta \Omega_V}{\delta \Omega_q} = \frac{q^2}{(V_g^\lambda)^3} \left[\left[\left\{ \mathbf{n}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{V}_{g1}^\lambda}{\partial \mathbf{q}} \right\} \times \left\{ \mathbf{n}_2 \cdot \frac{\partial \mathbf{V}_{g2}^\lambda}{\partial \mathbf{q}} \right\} \right] \cdot \mathbf{V}_g^\lambda \right]. \quad (1.82)$$

Далее мы покажем, что при вычислении коэффициента усиления $A^\lambda(\theta, \varphi)$ следует пользоваться сферической системой координат ($\mathbf{n}_1 = \mathbf{e}_\theta$, $\mathbf{n}_2 = \mathbf{e}_\varphi$). Это позволяет получить для него аналитическое выражение. Вектора групповой скорости и производная $\partial \mathbf{V}_{g1}^\lambda$ в сферической системе координат могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_g^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi), \quad \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi) = \mathbf{n} + S_\theta^\lambda \mathbf{e}_\theta + S_\varphi^\lambda \mathbf{e}_\varphi, \quad S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \theta}, \quad S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial V_{gi}^\lambda}{\partial \mathbf{q}} &= \frac{\partial V_{gi}^\lambda}{\partial q} \mathbf{n} + \frac{1}{q} \frac{\partial V_{gi}^\lambda}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{q \sin \theta} \frac{\partial V_{gi}^\lambda}{\partial \varphi} \mathbf{e}_\varphi.\end{aligned}\quad (1.83)$$

Здесь фазовая скорость $S^\lambda(\theta, \varphi)$ в модели анизотропного континуума определена в работах [44,69], а вектора \mathbf{n} , \mathbf{e}_θ и \mathbf{e}_φ образуют взаимно ортогональную тройку единичных векторов: $\mathbf{n} = \mathbf{q}/q = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ – единичный волновой вектор фонона, $\mathbf{e}_\theta = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta)$, $\mathbf{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$. Из формул (1.80)-(1.83) для векторов $\partial \mathbf{V}_{g1}^\lambda$ и $\partial \mathbf{V}_{g2}^\lambda$ в получим:

$$\begin{aligned} \delta V_{gi}^\lambda &= \left(\partial V_{gi}^\lambda / \partial \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{q}_1 \right) = \left(\mathbf{e}_\theta \partial V_{gi}^\lambda / \partial \mathbf{q} \right) \cdot \delta \mathbf{q} = (\delta \mathbf{q} / q) \cdot \left(\partial V_{gi}^\lambda / \partial \theta \right), \\ \delta V_{g2i}^\lambda &= \left(\partial V_{gi}^\lambda / \partial \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{q}_2 \right) = \left(\mathbf{e}_\varphi \partial V_{gi}^\lambda / \partial \mathbf{q} \right) \cdot \delta \mathbf{q} = (\delta \mathbf{q} / q \sin \theta) \cdot \left(\partial V_{gi}^\lambda / \partial \varphi \right). \end{aligned} \quad (1.84)$$

Из формул (1.80) - (1.83) получим выражение для $\delta \mathbf{S}_V = [\delta \mathbf{V}_{g1}^\lambda \times \delta \mathbf{V}_{g2}^\lambda]$. Как видно из рисунка 1.21б, площадка $\delta \mathbf{S}_V$ не ортогональна вектору групповой скорости \mathbf{V}_g^λ . Поэтому спроектируем ее на поверхность перпендикулярную единичному вектору групповой скорости: $\delta \mathbf{S}_V^\perp = (\delta \mathbf{S}_V \cdot \mathbf{V}_g^\lambda) / V_g^\lambda$ (см. затемненную область на рис. 1.21б). Тогда коэффициент $A^\lambda(\theta, \varphi)$ в сферической системе координат можно представить в виде:

$$\left(A^\lambda(\theta, \varphi) \right)^{-1} = \frac{\delta \Omega_V}{\delta \Omega_q} = \frac{1}{\left(V_g^\lambda \right)^3 \sin \theta} \times \left[\left(\left[\frac{\partial \mathbf{V}_g^\lambda}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{V}_g^\lambda}{\partial \varphi} \right] \cdot \mathbf{V}_g^\lambda \right) \right] \quad (1.85)$$

Использование декартовой системы координат приводит к результату:

$$\left(A^\lambda(\theta, \varphi) \right)^{-1} = \frac{1}{\left(V_g^\lambda \right)^3 \sin \theta} \cdot \left[\left(\frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \varphi} \right) V_{gy}^\lambda + \left(\frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \varphi} \right) V_{gx}^\lambda + \left(\frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \varphi} \right) V_{gz}^\lambda \right]. \quad (1.86)$$

Здесь $V_{gx}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{gy}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{gz}^\lambda(\theta, \varphi)$ – компоненты групповой скорости фононов с поляризацией λ в декартовой системе координат:

$$\begin{aligned} V_{gx}^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \left\{ \sin \theta \cos \varphi + S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) \cos \theta \cos \varphi - S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi) \sin \varphi \right\}, \\ V_{gy}^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \left\{ \sin \theta \sin \varphi + S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) \cos \theta \sin \varphi + S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi) \cos \varphi \right\}, \quad (1.87) \\ V_{gz}^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \left\{ \cos \theta - S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) \sin \theta \right\}. \end{aligned}$$

Выражение (1.86) для коэффициента усиления при использовании декартовой системы координат содержит более 300 членов и является слишком громоздким для анализа.

В работах [81,82] предложен другой способ вычисления коэффициента усиления: через производные углов групповой скорости θ_V^λ и

φ_V^λ , определяющих направление вектора \mathbf{V}_g^λ . Согласно определению (1.78) $A^\lambda(\theta, \varphi)$ можно записать в виде:

$$(A^\lambda(\theta, \varphi))^{-1} = \frac{\delta\Omega_q^\lambda}{\delta\Omega_g^\lambda} = \frac{d(\cos\theta_V^\lambda)d\varphi_V^\lambda}{d(\cos\theta)d\varphi}. \quad (1.88)$$

Здесь $\delta\Omega_q = d(\cos\theta)d\varphi$ – телесный угол в \mathbf{q} -пространстве под которым видна площадка $|\delta\mathbf{S}_q| = |\delta\mathbf{q}_1 \times \delta\mathbf{q}_2|$, образованная векторами $\delta\mathbf{q}_1$ и $\delta\mathbf{q}_2$, а $\delta\Omega_V^\lambda = d(\cos\theta_V^\lambda)d\varphi_V^\lambda$ – соответствующий ему телесный угол в пространстве групповых скоростей под которым видна площадка $|\delta\mathbf{S}_V \cdot \mathbf{V}_g^\lambda / V_g^\lambda|$, образованная векторами $\delta\mathbf{V}_{g_1}^\lambda$ и $\delta\mathbf{V}_{g_2}^\lambda$ (см. рис. 1.21). Тогда коэффициент усиления можно записать через якобиан перехода от переменных $(\theta_V^\lambda, \varphi_V^\lambda)$ к переменным (θ, φ) [81,82]:

$$(A^\lambda(\theta, \varphi))^{-1} = \begin{vmatrix} \partial(\cos\theta_V^\lambda)/\partial(\cos\theta) & \partial(\cos\theta_V^\lambda)/\partial\varphi \\ \partial\varphi_V^\lambda/\partial(\cos\theta) & \partial\varphi_V^\lambda/\partial\varphi \end{vmatrix} = \frac{1}{\sin\theta} \begin{vmatrix} \partial(\cos\theta_V^\lambda)/\partial\theta & \partial\varphi_V^\lambda/\partial\varphi \\ \partial(\cos\theta_V^\lambda)/\partial\varphi & \partial\varphi_V^\lambda/\partial\theta \end{vmatrix}. \quad (1.89)$$

Для нахождения зависимостей $\theta_V^\lambda(\theta, \varphi)$ и $\varphi_V^\lambda(\theta, \varphi)$ в работах [81,82] опять использовались выражения для групповой скорости в декартовой системе координат:

$$\mathbf{V}_g^\lambda = V_g^\lambda (\sin\theta_V^\lambda \cos\varphi_V^\lambda \mathbf{i} + \sin\theta_V^\lambda \sin\varphi_V^\lambda \mathbf{j} + \cos\theta_V^\lambda \mathbf{k}). \quad (1.90)$$

В результате получено:

$$\cos\theta_V^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{V_{gz}^\lambda(\theta, \varphi)}{V_g^\lambda(\theta, \varphi)} \quad \text{и} \quad \varphi_V^\lambda(\theta, \varphi) = \arctg \frac{V_{gy}^\lambda(\theta, \varphi)}{V_{gx}^\lambda(\theta, \varphi)}. \quad (1.91)$$

Хотя формулы (1.89) - (1.91) значительно упрощают численный анализ коэффициента усиления, по сравнению с использованием выражений (1.86)-(1.87), однако его расчет в декартовой системе координат остается достаточно громоздким. При этом формулы (1.89)-(1.91) не дают аналитического выражения для коэффициента $A^\lambda(\theta, \varphi)$.

Проведенный нами анализ показал, что использование сферической системы координат для векторов групповых скоростей и их производных позволяет получить точное аналитическое решение для коэф-

коэффициента усиления $A^\lambda(\theta, \varphi)$ и провести детальный анализ его особенностей. Для этого воспользуемся формулами (1.80) - (1.83) и вычислим скалярное произведение $\left(\left[\partial \mathbf{V}_g^\lambda / \partial \theta \times \partial \mathbf{V}_g^\lambda / \partial \varphi \right] \cdot \mathbf{V}_g^\lambda \right)$ в сферической системе координат. Тогда получим выражение для $A^\lambda(\theta, \varphi)$ через угловые компоненты групповой скорости $S_\theta^\lambda, S_\varphi^\lambda$ и их производные:

$$A^\lambda(\theta, \varphi) = \left(\tilde{V}_g^\lambda \right)^3 \left(\left(1 + (S_\theta^\lambda)^2 + \frac{\partial S_\theta^\lambda}{\partial \theta} \right) \left(1 + S_\theta^\lambda \frac{\cos \theta}{\sin \theta} + (S_\varphi^\lambda)^2 + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial S_\varphi^\lambda}{\partial \varphi} \right) - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial S_\theta^\lambda}{\partial \varphi} + S_\varphi^\lambda \left(S_\theta^\lambda \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right) \right)^2 \right)^{-1}. \quad (1.92)$$

Очевидно, что для модели изотропной среды угловые производные $S_\theta^\lambda, S_\varphi^\lambda$ равны нулю, а коэффициент усиления равен единице. Для дальнейшего анализа особенностей распространения потока фононов в упруго анизотропных кристаллах мы будем пользоваться аналитическим выражением (1.92).

Спектр упругих волн и групповые скорости реальных кристаллов имеют достаточно сложный вид. Чтобы наглядно представить телесный угол $\mathcal{R}\Omega_q$ в \mathbf{q} -пространстве и соответствующий ему угол $\mathcal{R}\Omega_V$ в пространстве групповых скоростей, обратимся к рис. 1.22. На нем изображены сечения изоэнергетической поверхности и волновой поверхности в пространстве групповых скоростей плоскостью грани куба для медленной поперечной моды в кристалле кремния (рис. 1.22). Волновая поверхность – это геометрическое место концов векторов групповой скорости для всевозможных направлений волновых векторов в кристалле [17]. Согласно [17] (см. уравнение (24.13)), её можно определить выражением

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{V}_g^\lambda) / S^\lambda(\theta, \varphi) = 1. \quad (1.93)$$

Волновую поверхность можно также задать параметрически, взяв в качестве параметров углы волнового вектора θ и φ . Для сечения $\{010\}$ она имеет вид:

$$\begin{cases} V_{gx}^\lambda = V_{gx}^\lambda(\theta, 0), \\ V_{gy}^\lambda = 0, \\ V_{gz}^\lambda = V_{gz}^\lambda(\theta, 0). \end{cases} \quad (1.94)$$

Здесь компоненты групповой скорости $\mathbf{V}_g^\lambda(\theta, \varphi)$ определены формулами (1.87). В окрестности направления $[110]$ телесный угол $\delta\Omega_V^{(1)}$ соответствует углу $\delta\Omega_q^{(1)}$ (см. рис. 1.22). В этом случае непосредственный расчет дает значения коэффициент $A_{[110]}^{t_2} < 1$, т.е. $\delta\Omega_V^{(1)} > \delta\Omega_q^{(1)}$, и медленная поперечная мода для этого направления дефокусируется (см. рис. 1.22 и 1.23).

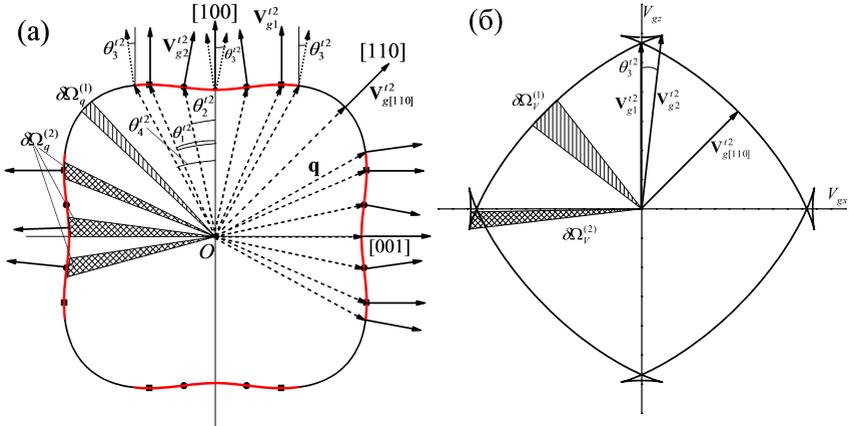


Рис. 1.22. Сечения изоэнергетической поверхности (а) и волновой поверхности в пространстве групповых скоростей (б) плоскостью грани куба для медленной поперечной моды в кристалле кремния. Значения углов $\theta_i^{t_2}$ для плоскости грани куба определены в Таблице 1.6. Вектора групповых скоростей $\mathbf{V}_{g1}^{t_2}$, $\mathbf{V}_{g2}^{t_2}$ и $\mathbf{V}_{g[110]}^{t_2}$ на рисунке (а) соответствуют векторам $\mathbf{V}_{g1}^{t_2}$, $\mathbf{V}_{g2}^{t_2}$ и $\mathbf{V}_{g[110]}^{t_2}$ на рисунке (б)

В окрестности направления $[100]$ телесный угол $\delta\Omega_V^{(2)}$ (см. рис. 1.22б) соответствует трем различным значениям телесного угла $\delta\Omega_q^{(2)}$ (см. рис. 1.22а). 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 направления фокусировки. Рассмотрим более подробно изоэнергетическую поверхность для моды t_2 . В работе [71] показано, что в окрестности направлений $[100]$ в интервале углов $-\theta_1 \leq \theta \leq \theta_1$ функция $\theta_g^{t_2}(\theta) < 0$, а при $\theta_2 = 0.21$ она имеет локальный минимум. Углы $\pm\theta_2$ определяют направления векторов групповой скорости $\mathbf{V}_{g2}^{t_2}$ на рисунке 1.22б к границам складок на волновой поверхности в пространстве групповых скоростей. Эти же углы определяют направления волновых векторов к точкам нулевой кривиз-

ны на изоэнергетической поверхности [71]. В этих точках происходит переход от выпуклых к вогнутым областям, и кривизна обращается в ноль. Положения точек нулевой кривизны обозначены кружочками на рисунке 1.22. В трехмерном случае эти точки образуют линии нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности. Поскольку фоннный поток ортогонален этой поверхности и обратно пропорционален её кривизне в данной точке [17,18,45], то точки нулевой кривизны математически соответствуют бесконечному потоку фононов от точечного источника тепла вдоль соответствующего направления групповой скорости.

1.6.2. Анализ угловых зависимостей коэффициента усиления

Воспользуемся (1.92) и проанализируем угловые зависимости коэффициента усиления в кристаллах кремния (см. рис. 1.23а). В модели изотропной среды коэффициент $A^\lambda(\theta,0) = 1$. Поэтому интервалы углов, в которых выполняется неравенство $A^\lambda(\theta,0) > 1$, можно отнести к области фокусировки фононов, а интервалы, в которых выполняется обратное неравенство – к области дефокусировки фононов. Очевидно, что в точках нулевой кривизны ($\theta = \theta_2^{t_2}$) на изоэнергетической поверхности коэффициент усиления поперечной моды t_2 обращается в бесконечность (см. рис. 1.23а, кривая 4). Минимального значения он достигает в направлении дефокусировки [110]: для Si $A_{[110]}^{t_2} = 0.23$. Продольные фононы фокусируются и дефокусируются в направлениях [111] и [100], соответственно, и в этих случаях для Si $A_{[111]}^L = 2.20$ и $A_{[100]}^L = 0.27$. В направлении [110] для них имеет место локальный максимум фокусировки, и $A_{[110]}^L = 1.42$. В кристалле второго типа CaF_2 коэффициент усиления быстрой поперечной моды в точках нулевой кривизны (при $\theta = \theta_2^{t_1}$) на изоэнергетической поверхности обращается в бесконечность (см. рис. 1.23б, кривая 3). Для продольных фононов в направлении [100] имеет место фокусировка, и коэффициент усиления $A_{[100]}^L = 3.21$, а в направлении [110] они дефокусируются, и коэффициент $A_{[110]}^L = 0.78$.

Проведенный нами анализ коэффициентов усиления для быстрой поперечной моды в кристаллах первого и медленной поперечной моды в кристаллах второго типа позволил обнаружить интересную особенность. Дело в том, что для волновых векторов в плоскости грани куба спектр обеих поперечных мод в кубических кристаллах является изотропным (см. рис. 1.1), и следовало ожидать, что коэффициент $A^\lambda(\theta,0)$ будет равен единице, как и в модели изотропной среды. Одна-

ко непосредственный расчет с использованием выражений (1.92) дал для него величину, которая в кристаллах кремния значительно больше единицы – $A^{t1} = 5.74$ (см. рис. 1.23а, кривая 3), а для кристалла второго типа CaF_2 заметно меньше единицы – $A^{t2} = 0.36$ (см. рис. 1.23в, кривая 4). Поскольку ранее на эту особенность коэффициента

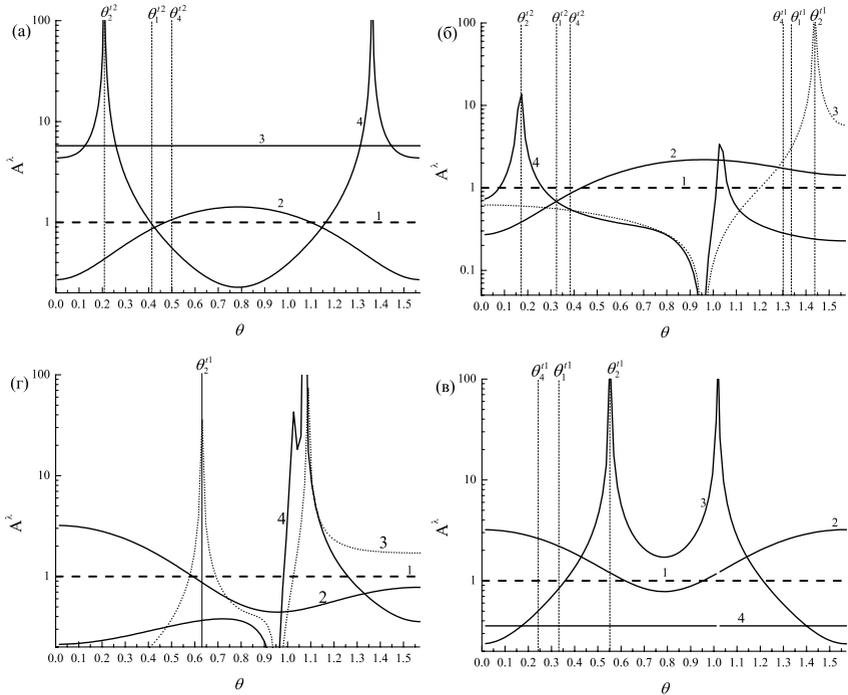


Рис. 1.23. Угловые зависимости коэффициентов усиления $A^\lambda(\theta, \varphi)$ в кристаллах Si (а), (б) и CaF_2 (в), (г) для волновых векторов в плоскости грани куба (а), (в) и диагональной плоскости (б), (г). Штриховые линии 1 соответствуют модели изотропной среды, кривые 2 – продольным фононам, кривые 3 – быстрой поперечной моде t_1 , кривые 4 – медленной поперечной моде t_2

усиления не обращалось внимание, то мы проанализируем её для кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии более детально. Для этого разложим фазовую скорость быстрой поперечной моды в кристаллах первого типа из уравнения (1.28) вблизи плоскости грани куба при $\varphi \ll 1$.

$$S^{t_1}(\theta, \varphi) \approx \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 - \frac{\delta}{2} \varphi^2 \cdot \sin^2 \theta \right), \quad \delta = \left[\frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \right] \frac{(k-1)(2k+1)}{(k+1)}. \quad (1.95)$$

Из (1.95) видно, что в кристаллах первого типа $S^{t_1}(\theta, 0)$ имеет максимальное значение. Из выражения (1.92) в случае $\varphi \rightarrow 0$ следует, что вклад в коэффициент усиления моды t_1 дает только вторая производная фазовой скорости $\partial^2 S^{t_1} / \partial \varphi^2$:

$$A^{t_1}(\theta, 0) = \left| 1 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 S^{t_1}}{\partial \varphi^2} \sqrt{\frac{\rho}{c_{44}}} \right|^{-1} = \left| \frac{1}{1 - \delta} \right|. \quad (1.96)$$

Для большинства полупроводниковых кристаллов первого типа значения параметра δ лежат в интервале $0 \leq \delta \leq 2$, и коэффициент усиления быстрой поперечной моды может значительно превосходить единицу. Однако для металлических кристаллов первого типа Na, K, Li и Cu параметр $\delta > 2$, и коэффициент усиления быстрой поперечной моды оказывается меньшим единицы (см. таблицу 1.10). Как видно из таблицы 1, корреляция между значениями коэффициента $A^{t_1}(\theta, 0)$ и величинами параметра анизотропии $k - 1$ отсутствует. Так, например, для кристаллов YAG параметр анизотропии мал ($k - 1 \approx 0.03$), и коэффициент усиления близок к единице: $A^{t_1}(\theta, 0) = 1.08$. Для кристаллов HgSe параметр анизотропии в 20 раз больше, однако коэффициент усиления $A^{t_1}(\theta, 0) = 1.02$ оказывается меньше, чем для кристаллов YAG. Для кристаллов GaN параметр $k - 1$ имеет максимальное значение, однако коэффициент усиления оказывается таким же, как для кристаллов YAG (см. таблицу 1.10). Из рассмотренных кристаллов первого типа коэффициент усиления достигает максимального значения для MgO ($A^{t_1}(\theta, 0) \approx 16.11$), у которого параметр анизотропии $k - 1 = 0.7$ мало отличается от значения для HgSe (см. таблицу 1.10). Минимальное значение коэффициента $A^{t_1}(\theta, 0) = 0.4$ достигает для щелочного металла Na, у которого параметр анизотропии упругой энергии имеет максимальное значение: $k - 1 = 45.1$.

В кристаллах второго типа ($k - 1 < 0$) для волновых векторов в плоскости грани куба фазовая скорость медленной поперечной моды t_2 , принимает минимальные значения. Для нее спектр фононов при $\varphi \ll 1$ определяется уравнением (1.95), и коэффициент усиления $A^{t_2}(\theta, 0)$ со-

впадает с выражением (1.96). Поскольку во всех кристаллах второго типа параметр $\delta < 0$, то коэффициент усиления для них оказывается

Таблица 1.10

Значения параметров $k - 1$, δ и коэффициентов усиления $A^1(\theta, 0)$ для быстрой поперечной моды в кубических кристаллах первого типа.

| Кристалл | $k - 1$ | δ | A^1 |
|----------|---------|----------|-------|
| Fe | 1.15 | 1.91 | 1.09 |
| Cu | 1.12 | 2.31 | 0.76 |
| GaAs | 0.9 | 1.49 | 2.04 |
| InSb | 0.81 | 1.63 | 1.58 |
| MgO | 0.7 | 1.06 | 16.11 |
| GaSb | 0.85 | 1.47 | 2.14 |
| Ge | 0.87 | 1.32 | 3.13 |
| GaN | 1.28 | 1.92 | 1.08 |
| LiF | 0.78 | 1.2 | 4.89 |
| Si | 0.67 | 1.17 | 5.74 |
| HgSe | 0.61 | 1.98 | 1.02 |
| Алмаз | 0.4 | 0.55 | 2.22 |
| YAG | 0.03 | 0.076 | 1.08 |
| Na | 45.1 | 3.47 | 0.40 |
| Li | 4.83 | 3.31 | 0.43 |
| K | 2.28 | 2.98 | 0.51 |

меньше единицы (см. таблицу 1.11 и рис. 1.23). Как видно из таблицы 1.11, для кристаллов второго типа величины коэффициента усиления обратно пропорциональны параметру анизотропии. Максимальное значение коэффициента усиления $A_{\{100\}}^{12} \approx 0.86$ принимает для кристалла YIG, у которого параметр анизотропии имеет минимальное значение: $k - 1 = -0.04$. Минимальное значение коэффициент $A_{\{100\}}^{12} \approx 0.19$ достигает для наиболее анизотропного кристалла KCl с параметром анизотропии $k - 1 = -0.63$. Таким образом, в коэффициентах усиления медленной поперечной моды для всех кристаллов второго типа преобладают эффекты дефокусировки фононов, поэтому для волновых векторов в плоскости грани куба они меньше единицы.

Таблица 1.11

Значения параметров $k - 1$, δ и коэффициентов усиления A'^2 в кристаллах второго типа для медленной поперечной моды и волновых векторов в плоскости грани куба.

| Кристалл | KCl | NaCl | PbS | CaF ₂ | SrF ₂ | YIG |
|----------|-------|-------|--------|------------------|------------------|-------|
| $k - 1$ | -0.63 | -0.48 | -0.466 | -0.33 | -0.204 | -0.04 |
| δ | -4.29 | -2.12 | -2.59 | -1.80 | -0.88 | -0.17 |
| A'^2 | 0.19 | 0.320 | 0.28 | 0.36 | 0.53 | 0.86 |

Из рисунков 1.23 видно, что коэффициент усиления медленной поперечной моды при $\theta \rightarrow 0$ в окрестности направления [100] претерпевает конечный разрыв. Для кристаллов Si этот коэффициент при $\theta \rightarrow 0$ имеет различные значения: при $\varphi = 0$ и $\pi/4$: при $\varphi = 0$ он оказывается значительно больше единицы $A'^2(0,0) \approx 4.4$, а при $\pi/4$ – меньше единицы $A'^2(0, \pi/4) = 0.72$. Этот результат оставался физически странным и до сих пор не был объяснен. Как видно из рисунков 1.12 (см. также [71]), в направлении [100] медленная поперечная мода фокусируется, как в плоскости грани куба ($\varphi = 0$), так и в диагональной плоскости ($\pi/4$). Поэтому коэффициент усиления в обоих случаях должен превышать единицу. Для объяснения этого парадокса требуется детальный анализ поведения коэффициента $A'^2(\theta, \varphi)$, исходя из формул (1.92), при малых значениях угла θ . Дело в том, что при анализе плотности фононных состояний и рассмотрении сечений изоэнергетической поверхности для $\varphi = 0$ и $\pi/4$ в разделе 1.5 (см. также [71]), мы зафиксировали угол φ и учитывали только производные фазовой скорости по θ . Тогда как при вычислении коэффициента $A^2(\theta, \varphi)$ учитываются производные по обоим углам. Коэффициент усиления характеризует изоэнергетическую поверхность и обратно пропорционален её гауссовой кривизне $A \sim 1/K$ [82]. В зависимости от её кривизны возможны различные типы особенностей: (а) типа «седло», (б) типа «вогнутый лепесток» [82]. Тип особенностей на трехмерной поверхности определяется гауссовой кривизной K [83]. Она может быть представлена в виде произведения главных кривизн поверхности: $K = K_1 K_2$. В работе [82] показано, что при $K < 0$ (K_1 и K_2 имеют разные знаки) поверхность имеет особенность типа седловой точки; если оба значе-

ния K_1 и K_2 отрицательны, то поверхность вогнутая («вогнутый лепесток»); если оба значения K_1 и K_2 положительны, то поверхность выпуклая.

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

$$S'^2(\theta, \varphi) \approx \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} (1 - \theta^2 \Delta_{t_2}(\varphi)), \quad (1.97)$$

$$\Delta_{t_2}(\varphi) = \frac{c_{11} - c_{44}}{4c_{44}} (k-1) \left[\sqrt{(1+2k) \cos^2 2\varphi + k^2} + k + 1 \right].$$

В кристаллах первого типа фазовая скорость медленных поперечных фононов в направлении [100] имеет абсолютный максимум. Для плоскости грани куба вторые производные по θ и φ имеют разные знаки ($\partial^2 S'^2 / \partial \theta^2 < 0$, $\partial^2 S'^2 / \partial \varphi^2 > 0$), поэтому в окрестности грани куба при $\theta \ll 1$ в кристаллах Si реализуется особенность типа седловой точки. Для диагональной плоскости вторая производная $\partial^2 S'^2 / \partial \theta^2$ остается отрицательной, а $\partial^2 S'^2 / \partial \varphi^2$ становится отрицательной. Поэтому в окрестности диагональной плоскости поверхность становится вогнутой («вогнутый лепесток»).

В предельном случае $\theta \ll 1$ из выражения (1.92) следует, что зависимость коэффициента усиления медленной поперечной моды от угла φ , которую при $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi/4$ можно представить в виде произведения двух множителей:

$$A'^2(0^+, \varphi) = \frac{1}{|1 - 2\Delta_{t_2}(\varphi)|} \cdot \frac{1}{|1 - 2\Delta_{t_2}(\varphi) - \Delta_{t_2}''(\varphi)|}, \quad (1.98)$$

где

$$\Delta_{t_2}''(\varphi) = \frac{d^2 \Delta_{t_2}(\varphi)}{d\varphi^2} = -\frac{c_{11} - c_{44}}{4c_{44}} (k-1)(1+2k) \left\{ \frac{4 \cos 4\varphi}{\sqrt{(1+2k) \cos^2 2\varphi + k^2}} + \frac{(1+2k) \sin^2 4\varphi}{\left(\sqrt{(1+2k) \cos^2 2\varphi + k^2} \right)^3} \right\}.$$

Для кристаллов Si при углах $\varphi = 0$ и $\pi/4$ имеем:

$$\begin{aligned}\Delta_{t_2}(0) &= \frac{c_{11} - c_{44}}{2c_{44}}(k^2 - 1) = 0.96, \quad (1 - 2\Delta_{t_2}(0))^{-1} = -1.09, \\ \Delta_{t_2}''(0) &= -\frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \frac{(k-1)(1+2k)}{(k+1)} = -1.17, \quad (1 - 2\Delta_{t_2}(0) - \Delta_{t_2}''(0))^{-1} = 4, \\ \Delta_{t_2}(\pi/4) &= \frac{c_{11} - c_{44}}{4c_{44}}(k-1)(2k+1) = 0.78, \quad (1 - 2\Delta_{t_2}(\pi/4))^{-1} = -1.79, \\ \Delta_{t_2}''(\pi/4) &= \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \frac{(k-1)(1+2k)}{k} = 1.88, \quad (1 - 2\Delta_{t_2}(\pi/4) - \Delta_{t_2}''(\pi/4))^{-1} = -0.41.\end{aligned}\tag{1.99}$$

Из приведенных выше значений следует: $A^{t^2}(0,0) = 4.36$ и $A^{t^2}(0,\pi/4) = 0.72$. Как видно из оценок (1.99), главную роль в выполнении неравенств $A^{t^2}(0,0) > 1$, а $A^{t^2}(0,\pi/4) < 1$ играет их зависимость от значения производной $\partial^2 S^{t^2} / \partial \varphi^2$. За счет изменения параметра $\Delta_{t_2}''(\varphi)$ множители $\|1 - 2\Delta_{t_2}(0) - |\Delta_{t_2}''(0)|\|^{-1} = 4$ и $(\|1 - 2\Delta_{t_2}(\pi/4) + |\Delta_{t_2}''(\pi/4)|\|)^{-1} = 0.41$, входящие в коэффициенты $A^{t^2}(0,0)$ и $A^{t^2}(0,\pi/4)$, отличаются друг от друга на порядок величины. При этом величины $|1 - 2\Delta_{t_2}(\varphi)|$ при переходе от плоскости грани куба к диагональной плоскости изменяются не столь существенно. Из (1.98) следует, что для плоскостей $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi/4$

$$\begin{aligned}K_1^{t^2}(0,\varphi) &= S_{[100]}^t \tilde{K}_1^{t^2}(0,\varphi), \quad \tilde{K}_1^{t^2}(0,\varphi) = 1 - 2\Delta_{t_2}(\varphi), \\ K_2^{t^2}(0,\varphi) &= S_{[100]}^t \tilde{K}_2^{t^2}(0,\varphi), \quad \tilde{K}_2^{t^2}(0,\varphi) = 1 - 2\Delta_{t_2}(\varphi) - \Delta_{t_2}''(\varphi).\end{aligned}\tag{1.100}$$

Для кристаллов первого типа с малой упругой анизотропией (таких, как YAG) изоэнергетическая поверхность моды t_2 является всюду выпуклой, а обе главные кривизны поверхности K_1 и K_2 положительны (см. таблицу 1.12). Из условий $K_1 > 0$, $K_2 > 0$ и выражений (1.99) следуют неравенства в которой изоэнергетическая поверхность остается выпуклой (см. рис. 1.24):

$$1 < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{2k}{(k-1)(k+2)(2k+1)}.\tag{1.101}$$

Как следует из (1.101), эта область ограничена кривой 1:

$$c_{11} / c_{44} = 1 + 2k / \{(k-1)(k+2)(2k+1)\}.\tag{1.102}$$

Следует отметить, что для всех кристаллов второго типа ($k - 1 \leq 0$) величины K_1 и K_2 положительны. Поэтому поверхности постоянной энергии поперечных фононов для них при $\theta \ll 1$ являются выпуклыми (см. таблицу 1.12).

Таблица 1.12

Значения коэффициентов усиления $A^{i2}(0^+, \varphi)$ и $A^{i1}(0^+, \varphi)$ и параметров, характеризующих кривизну изоэнергетических поверхностей для кристаллов первого и второго типа при $\theta \ll 1$

| Кристалл | c_{11}/c_{44} | $1/\tilde{K}_1^{i2}(0,0)$ | $1/\tilde{K}_2^{i2}(0,0)$ | $1/\tilde{K}_1^{i2}(0, \frac{\pi}{4})$ | $1/\tilde{K}_2^{i2}(0, \frac{\pi}{4})$ | $A^{i2}(0,0)$ | $A^{i2}(0, \frac{\pi}{4})$ |
|------------------|-----------------|---------------------------|---------------------------|--|--|---------------|----------------------------|
| Fe | 1.99 | -0.39 | -1.49 | 0.50 | -0.21 | 0.57 | 0.10 |
| Cu | 2.23 | -0.3 | -1.03 | -0.38 | -0.17 | 0.31 | 0.064 |
| GaAs | 2.00 | -0.62 | -8.31 | -0.86 | -0.29 | 5.16 | 0.25 |
| InSb | 2.23 | -0.56 | -6.37 | -0.77 | -0.26 | 3.56 | 0.20 |
| MgO | 1.94 | -1.32 | 3.26 | -2.33 | -0.47 | 4.32 | 1.10 |
| Ge | 1.92 | -0.77 | 50 | -1.11 | -0.34 | 38.5 | 0.38 |
| LiF | 1.92 | -0.94 | 7.14 | -1.47 | -0.39 | 6.74 | 0.58 |
| Na | 1.04 | -0.01 | -0.01 | -0.01 | -0.01 | 0.0002 | 0.0002 |
| Li | 1.37 | -0.09 | -0.13 | -0.1 | -0.07 | 0.011 | 0.007 |
| K | 1.74 | -0.16 | -0.31 | -0.19 | -0.11 | 0.05 | 0.02 |
| GaN | 1.89 | -0.37 | -1.25 | -0.47 | -0.2 | 0.46 | 0.096 |
| Si | 2.09 | -1.09 | 4.0 | -1.79 | -0.41 | 4.36 | 0.72 |
| Алмаз | 1.87 | 6.25 | 1.41 | 2.94 | -1.67 | 8.80 | 4.90 |
| YaG | 2.89 | 1.11 | 1.03 | 1.08 | 1.29 | 1.14 | 1.40 |
| Кристалл | c_{11}/c_{44} | $1/\tilde{K}_1^{i1}(0,0)$ | $1/\tilde{K}_2^{i1}(0,0)$ | $1/\tilde{K}_1^{i1}(0, \frac{\pi}{4})$ | $1/\tilde{K}_2^{i1}(0, \frac{\pi}{4})$ | $A^{i1}(0,0)$ | $A^{i1}(0, \frac{\pi}{4})$ |
| YIG | 3.52 | 0.84 | 0.95 | 0.87 | 0.69 | 0.8 | 0.6 |
| SrF ₂ | 4.0 | 0.48 | 0.82 | 0.56 | 0.26 | 0.39 | 0.15 |
| CaF ₂ | 4.74 | 0.33 | 0.75 | 0.41 | 0.15 | 0.25 | 0.06 |
| PbS | 5.12 | 0.25 | 0.74 | 0.33 | 0.1 | 0.19 | 0.03 |
| NaCl | 4.33 | 0.29 | 0.78 | 0.38 | 0.11 | 0.23 | 0.04 |
| KCl | 6.37 | 0.18 | 0.75 | 0.25 | 0.05 | 0.13 | 0.01 |

С увеличением параметра анизотропии $k - 1$ мы пересекаем кривую 1 и попадаем во вторую область, для которой при $\theta \ll 1$ в окрестности плоскости грани куба поверхность постоянной энергии медленных поперечных фононов является выпуклой ($K_1 > 0$ и $K_2 > 0$), а в окрест-

ности диагональной плоскости реализуется особенность типа седловой точки: ($K_1 > 0$, $K_2 < 0$, см. таблицу 1.12). Из системы неравенств $K_1(0,0) > 0$, $K_2(0,0) > 0$ при $\varphi = 0$ и $K_1(0, \pi/4) > 0$, $K_2(0, \pi/4) < 0$ при $\varphi = \pi/4$ для второй области получим:

$$1 + \frac{2k}{(k-1)(k+2)(2k+1)} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{1}{k^2 - 1}. \quad (1.103)$$

Она ограничена кривыми 1 и 2, последняя определяется выражением $c_{11}/c_{44} = 1 + 1/(k^2 - 1)$. Из рассмотренных кристаллов в эту область параметров попадает алмаз (см. рис. 1.24). В третьей области главные кривизны имеют разные знаки в обеих плоскостях: в плоскости грани куба $K_1 < 0$, $K_2 > 0$, а в диагональной плоскости $K_1 > 0$, $K_2 < 0$. Поэтому для обеих плоскостей на изоэнергетической поверхности образуются особенности типа седловых точек. Эта область расположена между кривыми 2 и 3 и определяется неравенствами:

$$1 + \frac{1}{k^2 - 1} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{2}{(k-1)(2k+1)}. \quad (1.104)$$

Однако ни один из рассмотренных в таблице 1.12 кристаллов в эту область не попал.

Дальнейшее увеличение параметра анизотропии $k - 1$ приводит к появлению следующих особенностей на изоэнергетической поверхности при $\theta \ll 1$: в окрестности плоскости грани куба для моды t_2 появляется особенность типа седловой точки ($K_1(0,0) < 0$, $K_2(0,0) > 0$), а в окрестности диагональной плоскости поверхность постоянной энергии становится вогнутой ($K_1(0, \pi/4) < 0$, $K_2(0, \pi/4) < 0$). Эти неравенства определяют четвертую область, ограниченную кривыми 3 и 4 (см. рис. 1.24):

$$1 + \frac{2}{(k-1)(2k+1)} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{k+1}{k^2(k-1)}. \quad (1.105)$$

В неё входят такие кристаллы, как Si, MgO, Ge, LiF (см. рис. 1.24). При дальнейшем увеличении параметра анизотропии $k - 1$ мы пересекаем кривую (4) и попадаем в пятую область, в которой при $\theta \ll 1$ поверхность постоянной энергии для моды t_2 становится вогнутой

для произвольного значения угла φ : обе кривизны K_1 и K_2 становятся отрицательны (см. табл. 1.12). Из выражений (1.99) и условия $c_{11} > c_{12}$ для пятой области получаем соотношения, определяющие кривые 4 и 5:

$$1 + \frac{k+1}{k^2(k-1)} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{2}{k-1}. \quad (1.106)$$

В пятую область попали кристаллы Fe, Cu, K, Li, Na, GaN с максимальной анизотропией упругой энергией (см. рис. 1.24).

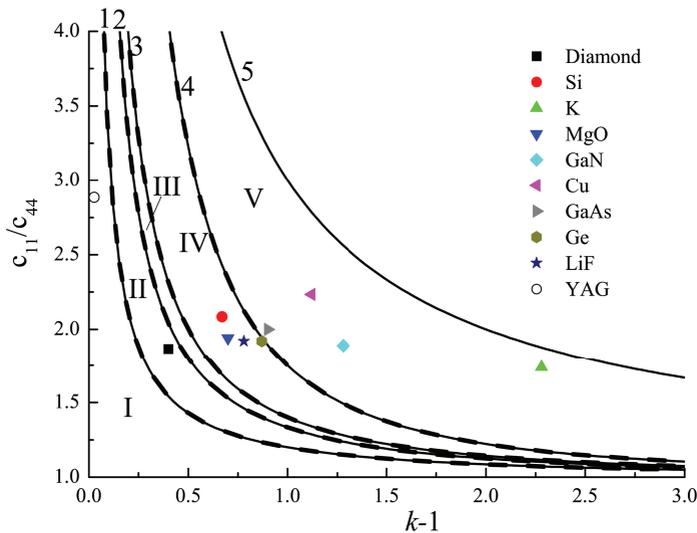


Рис. 1.24. Графики зависимости c_{11}/c_{44} от параметра $k-1$, определяющие пять областей с различной кривизной изоэнергетических поверхностей для медленных поперечных фононов в кубических кристаллах первого типа. Области I, II, III, IV, V ограничены кривыми 1, 2, 3, 4, 5, уравнения для которых задаются неравенствами (1.101), (1.103), (1.104), (1.105) и (1.106), соответственно. Сплошные кривые – результаты нашего анализа, штриховые кривые – результаты расчета Эвери [82].

Символами обозначены значения параметров для кристаллов первого типа

В работе [82] Эвери провел численный анализ кривизны изоэнергетических поверхностей для кубических кристаллов, исходя из формул (1.89)-(1.91), в координатах c_{11}/c_{44} и c_{12}/c_{44} без введения параметра

анизотропии $k - 1$. Он получил соотношения для модулей упругости, которые разделяют кристаллы с различным типом изоэнергетических поверхностей. Как видно из рисунка 1.24, в координатах c_{11}/c_{44} и $k - 1$ наши результаты (сплошные линии), согласуются с анализом, проведенным в [82] (штриховые линии).

В отличие от анализа [82] основное внимание нами уделено исследованию связи величин разрывов коэффициентов усиления поперечных мод в окрестности направления $[100]$ с изменениями параметра анизотропии и кривизны изоэнергетических поверхностей. Из таблицы 1.12 видно, что в окрестности направления $[100]$ при $\varphi = 0$ и $\pi/4$ для всех кристаллов коэффициенты $A^{i2}(0, \varphi)$ имеют различные значения, т.е. претерпевают конечные разрывы. Как показал проведенный выше анализ, эти разрывы обусловлены различной кривизной изоэнергетических поверхностей для волновых векторов в плоскостях грани куба и диагональных плоскостях. Причем, в кристаллах первого типа при переходе от плоскости грани куба к диагональной плоскости меняются не только величины главных кривизн для медленных поперечных мод, но и их знак (тип кривизн) (см. табл. 1.12). Однако для кристаллов второго типа изоэнергетические поверхности для быстрых поперечных мод остаются выпуклыми, изменяется только величины кривизн при $\varphi = 0$ и $\pi/4$ (см. табл. 1.12). Максимальные величины разрывов коэффициенты $A^{i2}(0, \varphi)$ достигают в кристаллах первого типа, входящих в четвертую область. Так, например, для Ge при $\theta \rightarrow 0$ коэффициенты $A^{i2}(0, 0) \cong 38$ и $A^{i2}(0, \frac{\pi}{4}) \cong 0.4$ отличаются на два порядка величины. Следует отметить, что для кристаллов первого типа нет корреляции между значением параметра анизотропии $k - 1$ и величиной разрыва в коэффициентах усиления. Однако такая корреляция ясно прослеживается для кристаллов второго типа: чем выше абсолютное значение параметра анизотропии $|k - 1|$, тем больше относительная величина разрывов в коэффициентах усиления в направлениях типа $[100]$ (см. табл. 1.12). Поскольку для них величины коэффициентов усиления меньше единицы, то абсолютные величины разрывов $A^{i1}(0, \varphi)$ малы.

Для устранения неоднозначности коэффициента $A^{i2}(\theta, \varphi)$ в окрестности направления $[100]$ для $\varphi = 0$ и $\pi/4$ Марис в [17] усреднил фононный поток по детектору в виде круга и получил средние значения коэффициента усиления. В работе [73] Лэкс и др. усреднили

коэффициент $A^{i2}(\theta, \varphi)$ поперечных фононов по прямоугольному детектору для всех симметричных направлений в кристалле. На примере кристалла GaAs было показано, что в зависимости от размера и формы детектора коэффициенты усиления поперечных фононов могут изменяться в несколько раз. Причем, для вырожденных направлений [100] и [111] даже для бесконечно малых размеров детектора результат зависит от его формы (см. [73], таблицы 4,6). Поскольку усреднение проводилось по малой окрестности симметричных направлений, то эти методы [17,73] не решали проблему расходимости фактора усиления в точках нулевой кривизны на поверхности медленности. Эта проблема была рассмотрена в работах [75,84]. Для произвольного направления в кристалле авторы [81] усреднили плотность потока фононов по площадке детектора ΔS , и тем самым устранили проблему расходимости коэффициента усиления. Для детекторов в виде квадратов $(4 \times 4) \times 10^{-6}$ и $(15.6 \times 15.6) \times 10^{-6}$ мм² они рассчитали плотность потока фононов в плоскости {100} для кристалла GaAs и получили качественное согласие с данными [79].

Итак, получено замкнутое аналитическое выражение для коэффициента усиления потока фононов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Проанализированы особенности его угловых зависимостей, а также типов кривизны изознергетических поверхностей акустических мод от величины и знака параметров анизотропии.

Подводя итог анализу влияния фокусировки на распространение фононных мод в упруго анизотропных кристаллах, можно утверждать, что подход, основанный на коэффициенте усиления [73-75,79,80-82,84], не позволяет пока сделать количественные оценки для плотностей состояний квазипоперечных мод. Однако он находит широкое применение при анализе баллистического транспорта фононов и построения фононных изображений [73-75,79,80-82,84]. С другой стороны в работах [69,71] нами предложен простой и наглядный способ оценки средних плотностей состояний (ПФС) для областей фокусировки и дефокусировки фононов, в котором изотропная среда также использовалась в качестве системы сравнения. Он дает достаточно грубую оценку влияния фокусировки на ПФС, но он свободен от отмеченных выше недостатков коэффициента усиления. Весомым аргументом в пользу развитого в работах [69,71] метода оценки средних ПФС является хорошее

согласие угловых зависимостей ПФС и длин свободного пробега: сектора максимумов обеих величин соответствуют областям фокусировки, а минимумов - областям дефокусировки фононов. Поэтому в дальнейшем при анализе влияния фокусировки поперечных фононов на фононный транспорт мы будем использовать этот метод.

1.7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты первой главы могут быть сформулированы следующим образом:

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

2. Разработан метод аппроксимации фононного спектра кубических кристаллов, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений, на всю зону Бриллюэна.

3. Анализ влияния фокусировки на угловое распределение плотности фононных состояний показал, что в упруго анизотропных кристаллах максимальные значения ПФС достигаются в областях фокусировки, а минимальные - для областей дефокусировки фононов. Поэтому направления максимумов ПФС в кристаллах первого типа становятся направлениями минимумов в кристаллах второго типа.

4. Рассмотрены особенности распространения фононных импульсов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Получено замкнутое аналитическое выражение для коэффициента усиления потока фононов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Проанализированы особенности его угловых зависимостей, а также типов кривизны изоэнергетических поверхностей акустических мод от величины и знака параметров анизотропии.

Глава 2. ВРЕМЕНА РЕЛАКСАЦИИ ФОНОНОВ ПРИ ДИФFUЗНОМ РАССЕЙАНИИ НА ГРАНИЦАХ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

В настоящей главе рассмотрим влияние анизотропии упругой энергии на релаксационные характеристики фононного газа при диффузном рассеянии на границах монокристаллических образцов. При достаточно низких температурах, когда, хотя бы в одном из направлений, длина свободного пробега фононов оказывается больше или сравнимой с характерным размером наноструктуры, то значения теплопроводности определяются характером взаимодействия фононов с поверхностью. Такую ситуацию, когда доминирующим механизмом релаксации фононов является диффузное рассеяние на границах, принято называть режимом граничного рассеяния или кнудсеновским течением фононного газа. Ниже проанализируем влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в монокристаллических образцах кремния в рамках теории Казимира – МакКарди [13,19]. Казимир [13] в модели изотропной среды рассчитал теплопроводность диэлектрического стержня бесконечной длины. Он предположил, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца с интенсивностью, которая зависит от температуры поверхности в соответствии с теорией излучения абсолютно черного тела. Теория Казимира [13] была обобщена в [19] на случай упруго анизотропных кристаллов. К предположению Казимира авторы добавили ещё два:

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

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

же погрешностью, как и для других направлений [19]. Авторам [19] не удалось получить аналитических выражений для времен релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образцов и проанализировать температурные зависимости теплопроводности для монокристаллических образцов кремния с различными направлениями теплового потока относительно кристаллографических осей. Поэтому в настоящей главе в рамках теории Казимира – МакКарди [13,19] будет рассмотрено кнудсеновское течение фононного газа в образцах конечной длины и определены времена релаксации фононов с учетом фокусировки.

В разделе 2.1 получены выражения для времен релаксации и длин свободного пробега при диффузном рассеянии фононов на границах для образцов бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. В разделе 2.2 рассчитаны времена релаксации фононов на границах и длины свободного пробега фононов в образцах конечной длины. В разделе 2.3 проведен анализ анизотропии длин свободного пробега фононов в объемных образцах кремния с круглым и квадратным сечениями. Показано, что результаты расчета хорошо согласуются с данными [19]. В разделе 2.4 проанализирована анизотропия длин свободного пробега фононов в образцах кремния с прямоугольным сечением при низких температурах и проведено сравнение с экспериментальными результатами [19].

2.1. РЕЛАКСАЦИЯ ФОНОНОВ НА ГРАНИЦАХ ОБРАЗЦОВ БЕСКОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ С КРУГЛЫМ, КВАДРАТНЫМ И ПРЯМОУГОЛЬНЫМ СЕЧЕНИЯМИ

Рассмотрим фононный транспорт в образцах бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями в рамках теории Казимира – МакКарди и др. [13,19] и определим времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах. Выберем направление градиента температуры вдоль оси образца и обозначим это направление X_3 . Проведем сечение образца плоскостью, перпендикулярной оси X_3 и проходящей через точку $X_3 = 0$ (см. рис. 2.1 и 2.2). Рассмотрим элемент поверхности dS в окрестности точки с координатами (X_1, X_2) .

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 $(\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda)N_{q\lambda}^{(0)}(X_3, \mathbf{q})dS$, где \mathbf{V}_g^λ – групповая скорость фононов, а $N_{q\lambda}^{(0)}(X_3, \mathbf{q}) = (\exp(\hbar\omega_q^\lambda / k_B T(X_3)) - 1)^{-1}$ – функция распределения Планка, соответствующая температуре $T(X_3)$ рассматриваемого элемента. Фононы, покидающие элемент поверхности dS , будут распространяться вдоль стержня, пока не столкнутся с поверхностью.

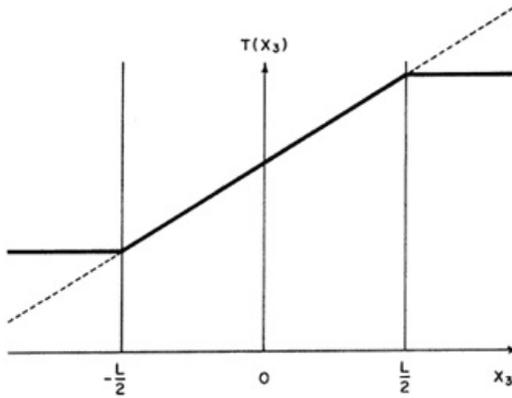


Рис. 2.1. Распределение температуры в образце длины L (сплошная линия) и в бесконечном образце (пунктирная линия). Рисунок взят из работы [19]

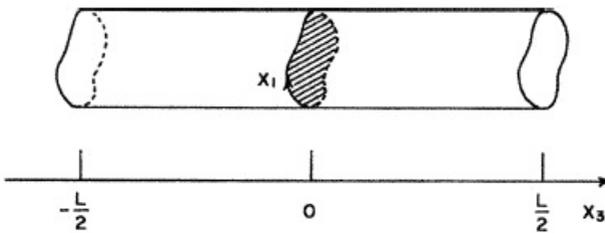


Рис. 2.2. Схематичное изображение образца длины L с произвольным поперечным сечением. Рисунок взят из работы [19]

Пусть вектор $\Lambda^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ определяет длину и направление свободного пробега фонона с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ . Предполагая, что распределение температур и потока тепла однородно по

образцу, авторы [19] подсчитали поток тепла, протекающий через плоскость $X_3 = 0$ слева направо и справа налево, и получили следующее выражение для теплопроводности

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

$$= \sum_{\lambda, q} \hbar \omega_q^{\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} I_{\infty}^{\lambda}$$

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

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.

На рисунке 2.3 приведена схема вычисления интеграла по контуру X_1 для цилиндрических образцов бесконечной длины, где R - радиус

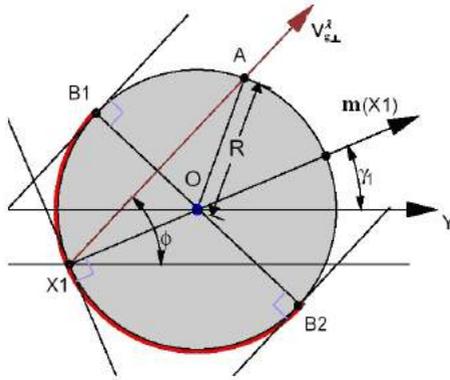


Рис. 2.3. Схема, иллюстрирующая вычисление контурного интеграла для цилиндрических образцов (показано сечение цилиндра плоскостью, перпендикулярной его оси)

цилиндра. Фонон покидает элемент поверхности в точке X_1 в направлении вектора групповой скорости \mathbf{V}_g^{λ} . Компоненты V_{g3}^{λ} и $V_{g\perp}^{\lambda} = \sqrt{(V_g^{\lambda})^2 - (V_{g3}^{\lambda})^2}$ являются проекциями вектора групповой скорости

на ось цилиндра и секущую плоскость, соответственно. Обозначим $\Lambda_{\perp}^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})$ проекцию длины свободного пробега фононов на плоскость сечения. 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 компонентой $V_{g\perp}^{\lambda}$ и осью Y . Из геометрии рисунка следует, что $\Lambda_{\perp}^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) = 2R \cos(\phi - \gamma_1)$, тогда

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

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 [19], 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

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

Выражение (2.5) совпадает с полученным в работе [19].

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 сече-

ния стержня, а V_{g1}^λ и V_{g2}^λ - проекции групповой скорости на боковые грани образца. На рисунке 2.4 приведен случай $\operatorname{tg}\phi = |V_{g2}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda| < \mu$. При вычислении интеграла по контуру X_1 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(μ D). Как и в случае образцов с круглым сечением, контурные интегралы по dX_1 вычисляются не по всему прямоугольному контуру, а захватывают только половину его.

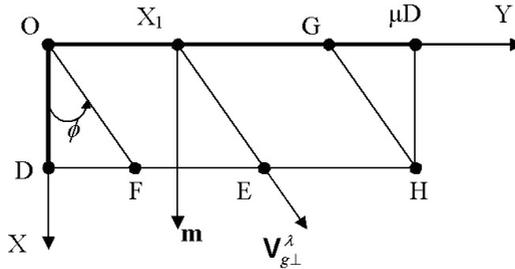


Рис. 2.4. Сечение образца в форме прямоугольного стержня плоскостью перпендикулярной его длинной оси. Показан случай $\operatorname{tg}\phi = |V_{g2}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda| > 1/\mu$. Жирными линиями отмечена та часть контура X_1 , по которому вычисляется интеграл

Дело в том, что при диффузном рассеянии фонона на границе для фиксированного угла ϕ мы должны интегрировать только по тем сторонам сечения образца, где скорость рассеянного фонона направлена внутрь образца (жирные линии на рисунке 2.4). Обозначим $\Lambda_\perp^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ проекцию длины свободного пробега на плоскость сечения. В области «В» она равна длине отрезка X_1E . Проекция длины свободного пробега на ось стержня $\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ связана с $\Lambda_\perp^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ соотношением (2.3). В случае $\operatorname{tg}\phi = |V_{g2}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda| < \mu$ в области «А» имеем:

$$(\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) = V_{g\perp}^\lambda \cdot \sin\phi, \quad \Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \frac{D-x}{\cos\phi}, \quad (2.6)$$

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda}.$$

Учитывая выражения (2.6), для интеграла по области «А» получим:

$$I_{\infty}^{\lambda}(A) = \frac{1}{2S_c} \int_0^D V_{g\perp}^{\lambda} \cdot \sin \phi \left\{ \frac{D-x}{\cos \phi} \cdot \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}} \right\}^2 dx = \frac{D^3}{2S_c} \left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}} \right)^2 \frac{|V_{g2}^{\lambda}|}{3}. \quad (2.7)$$

Аналогично для областей «В» и «С» получим:

$$I_{\infty}^{\lambda}(B) = \frac{D^3}{2S_c} \left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}} \right)^2 \left(\mu |V_{g1}^{\lambda}| - |V_{g2}^{\lambda}| \right), \quad I_{\infty}^{\lambda}(C) = I_{\infty}^{\lambda}(A). \quad (2.8)$$

Суммируя по всем областям при $|V_{g2}^{\lambda}| < \mu |V_{g1}^{\lambda}|$ для релаксационной функции $I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ получим

$$I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi) = \frac{D}{6\mu} \left[\left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}} \right)^2 \left(3\mu |V_{g1}^{\lambda}| - |V_{g2}^{\lambda}| \right) \right]. \quad (2.9)$$

Аналогично рассматривается случай $tg \phi = |V_{g2}^{\lambda}| / |V_{g1}^{\lambda}| > \mu$:

$$I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi) = \mu \frac{D}{6} \left[\left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g2}^{\lambda}} \right)^2 \left(3|V_{g2}^{\lambda}| - \mu |V_{g1}^{\lambda}| \right) \right]. \quad (2.10)$$

формулы (2.9) и (2.10) совпадают с полученными в работе [19]. Для того, чтобы перейти к образцам с квадратным сечением, достаточно в формулах (2.9) и (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 тем же результатам, что и в работе [19]. Далее мы покажем, что наш метод позволяет аналитически решить задачу о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины.

Из сравнения формулы (2.1) со стандартным выражением теплопроводности [9,85] в приближении времени релаксации

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

можно определить время релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образцов бесконечной длины следующим образом

$$\tau_{B\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi) = \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{\left(V_{g^3}^{\lambda}(\theta, \varphi)\right)^2}. \quad (2.12)$$

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

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

$$\tau_{B\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{D}{6\mu} \frac{\left(3\mu|V_{g^1}^{\lambda}| - |V_{g^2}^{\lambda}|\right)}{\left(V_{g^1}^{\lambda}\right)^2}, & \text{если } |V_{g^2}^{\lambda}| < \mu|V_{g^1}^{\lambda}|; \\ \mu \frac{D}{6} \frac{\left(3|V_{g^2}^{\lambda}| - \mu|V_{g^1}^{\lambda}|\right)}{\left(V_{g^2}^{\lambda}\right)^2}, & \text{если } |V_{g^2}^{\lambda}| > \mu|V_{g^1}^{\lambda}|. \end{cases} \quad (2.14)$$

Выражение (2.13) для времени релаксации фононов на границах бесконечных образцов с круглым сечением совпадает с полученным ранее выражением в работе [86].

Определим среднюю длину свободного пробега фононов Λ_{∞} для образцов бесконечной длины в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Рассмотрим область температур, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), когда применима модель анизотропного континуума. Воспользуемся известным выражением кинетической теории газов для теплопроводности

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

Приведем формулу (2.11) для теплопроводности к виду (2.15). Для этого выделим теплоемкость единицы объема C_V среднюю скорость фононов \bar{S}

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

где $\langle (S^\lambda)^{-3} \rangle = \int d\Omega_q (S^\lambda)^{-3} / 4\pi$ и $\langle (S^\lambda)^{-2} \rangle = \int d\Omega_q (S^\lambda)^{-2} / 4\pi$. Тогда выражение для средней длины пробега $\Lambda_{B\infty}$ может быть представлено в виде:

$$\Lambda_\infty = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda 1} \langle (S^{\lambda 1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 dx \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^3}, \quad x = \cos\theta. \quad (2.17)$$

Значения средних скоростей фононов и теплоемкости кристаллов кремния приведены в таблице 2.1

Таблица 2.1

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

| мода | $\langle (S^\lambda(\theta, \varphi)^{-2} \rangle$, $10^{-12} (\text{с}^2 \text{см}^{-2})$ | \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 | 1.213 | 9.069 | 0.5478 | 5.668 | 5.899 |
| t_1 | 3.081 | 5.688 | 2.2156 | | |
| t_2 | 3.873 | 5.058 | 3.1360 | | |

Как видно из выражений (2.15) - (2.17), в дебаевском приближении теплопроводность пропорциональна теплоемкости и при низких температурах следует зависимости T^3 - в соответствии с законом Дебая. Этот результат привлек внимание исследователей к теории Казимира [13] (заметим, что формула для теплопроводности в работе [13] содержит известную ошибку – лишний множитель $\pi/2$). Аналогичным образом можно определить средние длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды. Для этого представим теплопроводность в виде аддитивной суммы всех колебательных мод

$$\kappa_\infty(T) = \sum_{\lambda} \kappa_\infty^\lambda(T) = \sum_{\lambda} \frac{1}{3} C_V^\lambda \bar{S}^\lambda \Lambda_\infty^\lambda. \quad (2.18)$$

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

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

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 РЕЛАКСАЦИЯ ФОНОНОВ ПРИ ДИФFUЗНОМ РАССЕЯНИИ НА ГРАНИЦАХ ОБРАЗЦОВ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ С КРУГЛЫМ, КВАДРАТНЫМ И ПРЯМОУГОЛЬНЫМ СЕЧЕНИЯМИ

Рассмотрим кнудсеновское течение фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями и определим времена релаксации при диффузном рассеянии фононов на границах в рамках теории МакКарди и др. [19]. В этой теории предполагается, что вклад в теплопроводность образцов конечной длины вносят только те фононы, которые столкнутся с поверхностью образца в пределах его длины. А те фононы, которые столкнулись бы с поверхностью образца за пределами его длины, не вносят вклад в теплопроводность. Для этих фононов проекция длины пробега на ось X_3 определяется неравенством

$$\left| \Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \right| \geq \frac{L}{2}. \quad (2.20)$$

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

$$\kappa(T) = \kappa_\infty(T) - \Delta\kappa(T). \quad (2.21)$$

Согласно [19], поправка $\Delta\kappa(T)$ для образца длиной L имеет вид:

$$\Delta\kappa(T) = \sum_{\lambda, \mathbf{q}}^* \hbar \omega_q^\lambda \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \cdot \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1) \mathbf{v}_g^\lambda) \left\{ \left| \Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2 = \sum_{\lambda, \mathbf{q}}^* \hbar \omega_q^\lambda \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \Delta I^\lambda, \quad (2.22)$$

$$\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1) \mathbf{v}_g^\lambda) \left\{ \left| \Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2. \quad (2.23)$$

Звездочка у знака суммирования по волновым векторам в формуле (2.22) означает, что в поправку $\Delta\kappa(T)$ вносят вклад только те фононы, для которых выполняется неравенство (2.20). При вычислении интеграла по контуру X_1 мы также должны учитывать неравенство (2.20). Из выражений (2.21) - (2.23) следует, что теплопроводность образцов конечной длины можно представить в виде:

$$\kappa(T) = \sum_{\lambda, q}^* \hbar \omega_q^\lambda \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} I^\lambda(\theta, \varphi), \quad I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) - \Delta I^\lambda(\theta, \varphi). \quad (2.24)$$

Неравенство (2.20) накладывает ограничения на область интегрирования по волновым векторам в выражении для поправки к теплопроводности. Поэтому непосредственным образом получить аналитические выражения для величин $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ и определить времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах авторам [19] не удалось. Расчет теплопроводности для кубических кристаллов в режиме граничного рассеяния был выполнен численным методом только для симметричных направлений при температуре 3 К.

Для расчета температурных зависимостей теплопроводности в рамках релаксационного метода необходимо прежде всего определить времена релаксации фононов для всех актуальных процессов рассеяния (включая рассеяние фононов на границах 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 зависимости релаксационных характеристик 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 [19] 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 фононов на

границах для образцов конечной длины с круглым и прямоугольным сечениями (см. [20,21]).

Для цилиндрического образца длины L при вычислении контурного интеграла:

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

воспользуемся рисунком 2.3 и определим входящие в него величины (см. формулы (2.4)):

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda} 2R \cos(\phi - \gamma_1), \quad \left(\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^\lambda \right) = V_{g\perp}^\lambda \cos(\phi - \gamma_1) \quad (2.26)$$

Подставим выражение (2.4) в неравенство $\left| \Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \right| \geq L/2$, тогда получим:

$$\Delta^\lambda = \frac{L}{4R} \frac{V_{g\perp}^\lambda}{\left| V_{g3}^\lambda \right|} < 1. \quad (2.27)$$

Вычисление интеграла (2.25) с условием (2.27) проводится аналогично рассмотренному ранее случаю образцов бесконечной длины (см. рис 2.3) и дает следующий результат

$$\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{3}{2} I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) \left[\left(1 + (\Delta^\lambda)^2 \right) \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right)^3 - \Delta^\lambda \left(\arccos \Delta^\lambda + \Delta^\lambda \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right) \right] \quad (2.28)$$

При выполнении противоположного неравенства $\Delta^\lambda(\theta, \varphi) > 1$ величина $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = 0$, тогда $I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)$. Таким образом для функции $I^\lambda(\theta, \varphi)$ имеем [20]:

$$I^\lambda(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{4R(V_{g3}^\lambda)^2}{\pi V_{g\perp}^\lambda} \left[1 - \left(1 + (\Delta^\lambda)^2 \right) \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right)^3 + \Delta^\lambda \left(\arccos \Delta^\lambda + \Delta^\lambda \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right) \right], \\ \text{если } \Delta^\lambda(\theta, \varphi) \leq 1; \\ I_\infty^\lambda(\theta, \varphi), \text{ если } \Delta^\lambda(\theta, \varphi) > 1. \end{cases} \quad (2.29)$$

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 сечением ограничения, накладываемые условием (2.20), в выражениях для теплопроводности (2.21) и (2.22) сводятся к системе неравенств между геометрическим параметром $k_0 = L/2D$ и отношениями компонент групповой скорости фононов. Поскольку эти неравенства могут быть включены в определение релаксационных функций $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ и $I^\lambda(\theta, \varphi)$, то мы получаем возможность определить времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образца в соответствии с выражением:

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi))^2}. \quad (2.30)$$

Время релаксации фононов на границах цилиндрических образцов, как следует из выражения (2.29), можно представить в виде кусочно-гладких функций:

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{4R}{\pi V_{g\perp}^\lambda} \left[1 - (A^\lambda)^2 \right] \sqrt{1 - (A^\lambda)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (A^\lambda)^2} \right)^3 + A^\lambda \left(\arccos A^\lambda + A^\lambda \sqrt{1 - (A^\lambda)^2} \right), & \text{если } A^\lambda(\theta, \varphi) \leq 1; \\ \tau_{B\infty}^\lambda(\theta, \varphi) = (8R/3\pi) / \sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}, & \text{если } A^\lambda(\theta, \varphi) > 1. \end{cases} \quad (2.31)$$

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

Далее рассмотрим кнудсеновское течение фононного газа в образцах длины L с прямоугольным поперечным сечением $D \times \mu D$. Вычисление контурного интеграла

$$\Delta I^\lambda = \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 \left(\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^\lambda \right) \left\{ \left| \Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2 \quad \text{при} \quad \left| \Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \right| \geq \frac{L}{2}. \quad (2.32)$$

в этом случае производится аналогично случаю образцов бесконечной длины (см. рис. 2.4). При интегрировании по контуру по X_1 выделим три области «А», «В» и «С» (см. рис. 2.4). Следует отметить, что контурные интегралы по dX_1 в формулах (2.25) и (2.32) вычисляются не по всему прямоугольному контуру, как указано в [19], а захватывают только половину его, как и для образцов бесконечной длины. Для области «А»

(см. рис. 2.4) из неравенства $|\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq L/2$ можно получить следующее ограничение на область интегрирования:

$$0 \leq x \leq x_{\max}, \quad x_{\max} = D - \frac{L}{2} \cdot \frac{V_{g\perp}^\lambda \cos \phi}{V_{g3}^\lambda} = D \left(1 - k_0 \cdot \frac{V_{g1}^\lambda}{V_{g3}^\lambda} \right), \quad k_0 = \frac{L}{2D}. \quad (2.33)$$

Учитывая (2.32) и (2.33), для интеграла по области «А» получим:

$$\Delta I_\lambda(A) = \frac{1}{2S_c} \int_0^{x_{\max}} V_{g\perp}^\lambda \cdot \sin \phi \left\{ \left| \frac{D-x}{\cos \phi} \cdot \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda} - L/2 \right| \right\}^2 dx. \quad (2.34)$$

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

$$\left| V_{g3}^\lambda / V_{g1}^\lambda \right| \geq k_0. \quad (2.35)$$

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

$$\Delta I_\lambda(A) = \frac{D}{6\mu} \left\{ \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{|V_{g\perp}^\lambda|} \cdot \frac{1}{\cos^2 \phi} - k_0 \cdot |V_{g3}^\lambda| \cdot \frac{1}{3\cos \phi} + \frac{(k_0)^2}{3} |V_{g\perp}^\lambda| - (k_0)^3 \cdot \frac{(V_{g\perp}^\lambda)^2}{|V_{g3}^\lambda|} \cdot \cos \phi \right\}. \quad (2.36)$$

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 (2.35). Непосредственный расчет интегралов по областям «В» и «С» дает

$$\Delta I_\lambda(B) = \frac{D}{2\mu} \left\{ \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{|V_{g\perp}^\lambda|} \cdot \frac{1}{\cos \phi} - 2k_0 \cdot |V_{g3}^\lambda| + k_0^2 \cdot |V_{g\perp}^\lambda| \cdot \cos \phi \right\} (\mu - tg\phi), \quad \Delta I_\lambda(C) = \Delta I_\lambda(A). \quad (2.37)$$

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

$$I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) - \Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = Dk_0 |V_{g3}^\lambda| \left\{ 1 - \frac{k_0}{2\mu} \frac{(V_{g2}^\lambda + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{(V_{g3}^\lambda)} + \frac{(k_0)^2}{3\mu} \frac{|V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{(V_{g3}^\lambda)^2} \right\}. \quad (2.38)$$

При выполнении неравенств $|V_{g3}^\lambda / V_{g2}^\lambda| < k_0 / \mu$ и $|V_{g2}^\lambda| < \mu |V_{g1}^\lambda|$ выражение для $I^\lambda(\theta, \varphi)$ в точности совпадает с (2.38). Если ($|V_{g3}^\lambda| / |V_{g1}^\lambda| < k_0$ и $|V_{g2}^\lambda| < \mu |V_{g1}^\lambda|$) или ($|V_{g3}^\lambda / V_{g2}^\lambda| < k_0 / \mu$ и $|V_{g2}^\lambda| > \mu |V_{g1}^\lambda|$), то $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = 0$, и функции $I^\lambda(\theta, \varphi)$ определяются выражениями (2.9) и (2.10), полученными ранее для образцов бесконечной длины [19]. Для того, чтобы перейти к образцам с квадратным сечением, достаточно в формулах (2.9), (2.10) и (2.38) положить $\mu = 1$.

Из приведенного выше анализа видно (см. формулы (2.38)), что при аналитическом расчете ограничения, накладываемые условием (2.20), для образцов конечной длины с прямоугольным сечениями также могут быть включены в определение функций $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ и $I^\lambda(\theta, \varphi)$. Поэтому мы получаем возможность определить времена релаксации фононов различных поляризации при диффузном рассеянии на границах образцов с прямоугольным сечением в виде кусочно-гладких функций для различных интервалов углов θ и φ . Выражения для них имеют следующий вид [21]:

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{D}{|V_{g3}^\lambda|} k_0 \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{(|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{\mu |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2}{3} \frac{|V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{\mu (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}, \\ \text{если } \frac{|V_{g3}^\lambda|}{|V_{g1}^\lambda|} \geq k_0 \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda| \text{ или } \frac{|V_{g3}^\lambda|}{|V_{g2}^\lambda|} \geq \frac{k_0}{\mu} \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|, \\ \tau_{B\infty}^\lambda, \text{ если } \frac{|V_{g3}^\lambda|}{|V_{g1}^\lambda|} < k_0 \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda| \text{ или } \frac{|V_{g3}^\lambda|}{|V_{g2}^\lambda|} < \frac{k_0}{\mu} \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|. \end{cases} \quad (2.39)$$

Для того чтобы перейти к образцам с квадратным сечением, достаточно в формуле (2.39) положить $\mu = 1$. Итак, при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым и прямоугольным сечениями времена релаксации фононов определяются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов θ и φ , которые зависят от соотношений между компонентами групповых скоростей фононов и геометрическими параметрами образцов.

Выражения для длин свободного пробега Λ и соответствующих величин для каждой из ветвей фононного спектра Λ^λ для образцов ко-

нечной длины находятся аналогично случаю образцов бесконечной длины (см. раздел 2.1). В результате получим

$$\Lambda = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda 1} \langle (S^{\lambda 1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 dx \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I^{\lambda}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}, \quad (2.40)$$

$$\Lambda^{\lambda} = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\langle (S^{\lambda})^{-2} \rangle} \int_{-1}^1 dx \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I^{\lambda}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}, \quad x = \cos \theta, \quad (2.41)$$

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 (2.38). Как и в случае образцов бесконечной длины, для граничного рассеяния в модели анизотропного континуума они выражаются через двукратный угловой интеграл.

Из формул (2.39) и (2.40) следует, что коэффициенты теплопроводности $\tilde{\kappa}(T) = \kappa(T)/D$ и, соответственно, длины свободного пробега $\tilde{\Lambda} = \Lambda(L, W, D)/D$, нормированные на толщину пленки D , зависят не от трех геометрических параметров образца (D , W и L), а только от двух отношений: параметров $\mu = W/D$ и $k_0 = L/2D$:

$$\kappa(T, L, W, D) = D\tilde{\kappa}(T, k_0, \mu), \quad \Lambda(L, W, D) = D \cdot \tilde{\Lambda}(k_0, \mu). \quad (2.42)$$

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

$$\Lambda(L, D, D) = D \cdot \tilde{\Lambda}(k_0). \quad (2.43)$$

Формулы (2.42) и (2.43) представляют интерес для экспериментальной проверки применимости нашей теории при исследовании фононного транспорта в упруго анизотропных кристаллах.

2.3. АНИЗОТРОПИЯ ДЛИН СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В ОБРАЗЦАХ КРЕМНИЯ С КРУГЛЫМ И КВАДРАТНЫМ СЕЧЕНИЯМИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Рассмотрим фононный транспорт в объемных образцах кремния при температурах, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), когда доминирует рассеяние фононов на границах. Сравним результаты расчета в модели анизотропного континуума с экспериментальными данными [19] для симметричных направлений. Из газокинетической формулы для теплопроводности $\kappa = 1/3 C_V \bar{S} \Lambda$ следует, что анизотропия теплопроводности определяется длиной свободного пробега фононов Λ , поскольку удельная теплоемкость C_V и средняя скорость фонона \bar{S} не зависят от направления потока тепла. Проанализируем сначала длины свободного пробега фононов в модели изотропной среды и убедимся, что в предельных случаях образцов бесконечной длины из наших формул (2.5), (2.9) и (2.10) следуют известные результаты для длин Казимира $\Lambda_C = \Lambda_\infty$.

В изотропных средах фазовые скорости фононов S^λ не зависят от углов θ и φ , а направления фазовой и групповой скоростей совпадают $V_{gi}^\lambda = S^\lambda n_i$, где $\mathbf{n} = \mathbf{q}/q = \{\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta\}$ – единичный волновой вектор. Поэтому из формул (2.40) – (2.41) следует, что длины пробега фононов различных поляризаций равны друг другу и средней длине пробега:

$$\Lambda^L = \Lambda^t = \Lambda = D \frac{3}{4\pi} \cdot \int d\Omega_q \tilde{I}(\theta, \varphi), \quad \tilde{I}(\theta, \varphi) = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{DS^\lambda}, \quad \tilde{\Lambda} = \Lambda / D. \quad (2.44)$$

Для образцов с круглым сечением диаметром $D=2R$ и длиной L релаксационные функции $\tilde{I}(\theta, \varphi)$ преобразуются к виду:

$$\tilde{I}(\theta) = \frac{4 \cos^2 \theta}{3\pi \sin \theta}, \quad \text{при } \Delta \geq 1, \quad \Delta = \frac{L}{4R} \operatorname{tg} \theta, \quad (2.45)$$

$$\tilde{I}(\theta) = \frac{4 \cos^2 \theta}{3\pi \sin \theta} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[(1 + \Delta^2) \sqrt{1 - \Delta^2} - \frac{1}{3} (\sqrt{1 - \Delta^2})^3 - \Delta (\arccos \Delta + \Delta \sqrt{1 - \Delta^2}) \right] \right\}, \quad (2.46)$$

при $\Delta < 1$.

Для стержней бесконечной длины с круглым сечением релаксационная функция $\tilde{I}(\theta, \varphi)$ определяется выражением (2.45). Подстановка формулы (2.45) в выражение (2.44) дает:

$$\Lambda_c = \Lambda_\infty = 2R \cdot \frac{3}{4\pi} \cdot 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{4}{3\pi} \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} = 2R \cdot \quad (2.47)$$

Таким образом для диэлектрического стержня бесконечной длины с круглым сечением мы получили результат Казимира [13]: длина свободного пробега фононов равна его диаметру.

Для образцов с квадратным сечением со стороной D и длиной L релаксационные функции (2.9), (2.10) и (2.38) преобразуются к виду:

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = \begin{cases} (n_3 / n_1)^2 (3|n_1| - |n_2|) / 6, & \text{если } |n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3 / n_1| < k_0, \\ (n_3 / n_2)^2 (3|n_2| - |n_1|) / 6, & \text{если } |n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3 / n_2| < k_0; \end{cases} \quad (2.48)$$

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = k_0 |n_3| \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{|n_2| + |n_1|}{|n_3|} + \frac{(k_0)^2}{3} \frac{|n_1| |n_2|}{(n_3)^2} \right\}, \text{ если } \begin{cases} (|n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3 / n_1| \geq k_0) \text{ или} \\ (|n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3 / n_2| \geq k_0) \end{cases} \quad (2.49)$$

Подставим формулу (2.48) в выражение (2.44) для длины Казимира в образцах с квадратным сечением, тогда получим известный результат (см., например, [9]):

$$\Lambda_c = \frac{D}{\pi} \int_0^\pi \cos^2 \theta d\theta \int_0^{\pi/4} d\varphi \left(\frac{3}{\cos \varphi} - \frac{\sin \varphi}{\cos^2 \varphi} \right) = \frac{D}{2} [3 \ln(\sqrt{2} + 1) - \sqrt{2} + 1] \cong 1.115D. \quad (2.50)$$

Из выражений (2.44)-(2.50) следует, что длины пробега фононов в изотропных средах не зависят от упругих модулей, а определяются полностью геометрическими размерами образцов. Однако в упруго анизотропных кристаллах длины пробега различны для фононов разных поляризаций и зависят не только от геометрических параметров образцов, но и от направления теплового потока в кристалле. Поэтому результаты, полученные для изотропных сред, могут быть использованы в качестве удобной системы сравнения для зависимостей длин пробега фононов различных колебательных мод в упруго анизотропных кристаллах.

Проанализируем угловые зависимости длин свободного пробега фононов при рассеянии на границах для образцов кремния с круглым и квадратным сечениями при низких температурах. Спектр и групповые скорости фононов определим в системе координат по ребрам куба. Рассмотрим вращение потока тепла (оси образца) в двух плоскостях: (1) в плоскости грани куба YZ ; и (2) в диагональной плоскости. Пусть угол ψ задает отклонение потока тепла от оси Z , направленной по ребру куба. Определим систему координат с осью «3» вдоль направления теплового потока.

$$(1) \nabla_r T = \{\nabla_x T, 0, \nabla_z T\} = |\nabla_r T| \{0, -\sin \psi, \cos \psi\}, \quad V_{g3}^\lambda = -V_{gx}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad (2.51)$$

$$(2) \nabla_r T = \{\nabla_x T, \nabla_y T, \nabla_z T\} = |\nabla_r T| \{-\sin \psi / \sqrt{2}, \sin \psi / \sqrt{2}, \cos \psi\}, \quad V_{g3}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \psi. \quad (2.52)$$

Зависимости $\Lambda_B(\psi)$ от угла ψ будут определяться зависимостями компонент групповой скорости фононов V_{g1}^λ , V_{g2}^λ и V_{g3}^λ , входящих в релаксационные функции $I^\lambda(\theta, \varphi)$. Для цилиндрических образцов достаточно задать компоненту групповой скорости фононов, параллельную тепловому потоку. Для рассматриваемых случаев вращения градиента температуры в плоскости грани куба или диагональной плоскости имеем

$$(1) V_{g3}^\lambda = -V_{gy}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}, \quad (2.53)$$

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

Компоненты групповой скорости фононов в декартовой системе координат имеют вид

$$\begin{aligned} V_{gx}^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \{\sin \theta \cos \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \cos \varphi - S_\varphi^\lambda \sin \varphi\}, \\ V_{gy}^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \{\sin \theta \sin \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \sin \varphi + S_\varphi^\lambda \cos \varphi\}, \\ V_{gz}^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \{\cos \theta - S_\theta^\lambda \sin \theta\}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Для образцов с квадратным сечением величина теплопроводности зависит также от ориентации боковых граней. Для анализа угловых за-

висимостей выберем ориентацию граней следующим образом. В случае вращения градиента температур в плоскости грани куба YZ ось X остается стационарной, поэтому одну из боковых граней возьмем перпендикулярной оси X : $V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda$. В качестве направления V_{g2}^λ возьмем ось, лежащую в плоскости YZ и перпендикулярную градиенту температуры

$$V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda \cos \psi + V_{gz}^\lambda \sin \psi. \quad (2.55)$$

В случае вращения градиента температуры в диагональной плоскости стационарной осью является направление $[110]$, перпендикулярное этой плоскости. Поэтому выберем его в качестве направления V_{g1}^λ

$$V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2}. \quad (2.56)$$

В качестве направления V_{g2}^λ выберем ось, лежащую в диагональной плоскости и перпендикулярную градиенту температур

$$V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \psi. \quad (2.57)$$

Проанализируем угловые зависимости длин Казимира для образцов с круглым и квадратным сечениями, рассчитанные по формулам (2.17) и (2.19). При равенстве площадей квадратного и круглого сечений ($D^2 = \pi R^2$), нормируем длины Казимира Λ_C на сторону основания D для образца с квадратным сечением ($\tilde{\Lambda}_C(\psi) = \Lambda_C(\psi) / D$) и на $\sqrt{\pi} R$ для образца с круглым сечением 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 2.5а, в окрестности направлений $[100]$ при углах $\psi = \pm 0.06 + n\pi / 2$ (n – целое число) для медленной поперечной моды длины Казимира достигают максимальных значений. Они в 2 раза больше значений Λ_C^t для быстрой поперечной моды и в 3 раза

больше, чем Λ_C^L для продольных фононов. При переходе к направлениям [110] ситуация меняется: длины Казимира медленной поперечной моды уменьшаются в 3 раза и принимают минимальные значения. В направлениях [110] длины Казимира для быстрой поперечной моды достигают максимальных значений. Они в 2.8 и 1.6 раза больше, чем для медленных поперечных и продольных фононов, соответственно. Для направлений [111] максимальные значения длины Казимира достигают для продольных фононов. В этих направлениях они 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 $\Lambda_C^{[100]} : \Lambda_C^{[110]} : \Lambda_C^{[111]} = 1.74 : 1.2 : 1$. Из сравнения результатов, полученных для кристаллов кремния и модели изотропной среды видно, что в направлениях фокусировки длины Казимира для всех фононных мод оказываются больше, а в направлениях дефокусировки меньше, чем в модели изотропной среды (см. рис. 2.5).

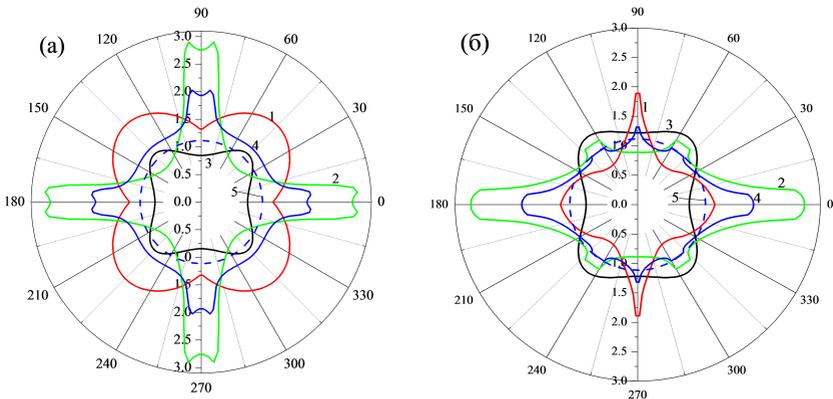


Рис. 2.5. Угловые зависимости приведенных длин Казимира $\tilde{\Lambda}_C^\lambda(\psi) = \Lambda_C^\lambda(\psi) / D$ и $\tilde{\Lambda}_C(\psi) = \Lambda_C(\psi) / D$ для образцов с квадратным сечением в случаях, когда градиент температур вращается в плоскости грани куба (а) и диагональной плоскости (б): 1 – для быстрой поперечной моды, 2 – для медленной поперечной моды, 3 – для продольной моды, 4 – средняя длина Казимира, 5 – длина Казимира в модели изотропной среды

Использование выражений, полученных нами для длин свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния, позволили описать экспериментальные данные по анизотропии теплопроводности

для образцов кремния с квадратным сечением при низких температурах [19]. На рисунке 2.6 приведены угловые зависимости длин свободного пробега фононов в образцах кремния длины $L=2.9$ см с квадратным поперечным сечением $D=0.293$ см, рассчитанные по формулам (2.40) и (2.41). Для всех симметричных направлений результаты расчета хорошо согласуются с данными эксперимента [19]. Из рисунков 2.6 видно, что длины свободного пробега фононов достигают максимальных значений для каждой колебательной моды в направлениях фокусировки, причем, в этих направлениях они превосходят длины пробега

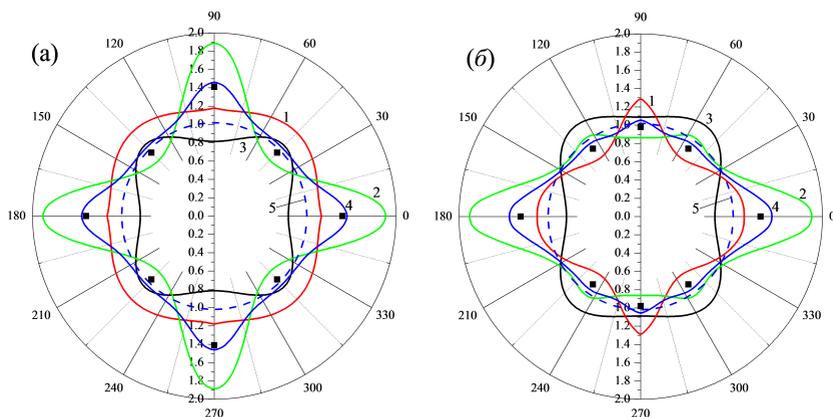


Рис. 2.6. Угловые зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}^{\lambda}(\psi) = \Lambda^{\lambda}(\psi)/D$ и $\tilde{\Lambda}(\psi) = \Lambda(\psi)/D$ для образцов длины $L=2.9$ см с квадратным сечением $D=0.293$ см в случаях, когда градиент температур лежит в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). 1 – быстрая поперечная мода, 2 – медленная поперечная мода, 3 – продольная мода, 4 – средняя длина свободного пробега, 5 – длина свободного пробега в модели изотропной среды.

Символы – экспериментальные данные [19]

остальных колебательных мод и длины пробега для модели изотропной среды. В направлениях дефокусировки они достигают минимальных значений и оказываются меньше, чем в модели изотропной среды. Так, например, фононы медленной поперечной моды фокусируются в направлении $[100]$, и их длина свободного пробега превосходит длины свободного пробега фононов для быстрой поперечной и продольной мод в 1.6 раза и 2.4 раза, соответственно, а среднюю длину свободного пробега фононов в 1.3 раза. Фононы быстрой поперечной моды фоку-

сируются в направлении [110], и их длина свободного пробега имеет максимальное значение. Она превосходит в этом направлении длины свободного пробега для фононов медленной поперечной моды в 1.5 раза и продольной моды в 1.2 раза, а также среднюю длину пробега в 1.2 раза. Продольные фононы фокусируются в направлении [111], для этого направления 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 1.8 и 1.5 раза, соответственно, в то время как для продольной моды Λ^L возрастает в 1.5 раза. В результате длина свободного пробега продольных фононов оказывается больше в 1.6 и 1.2 раза, чем для быстрых и медленных поперечных фононов. В этом направлении она превосходит среднюю длину свободного пробега фононов в 1.3 раза. Для симметричных направлений отношение средних длин свободного пробега фононов составляет $\Lambda^{[001]}:\Lambda^{[101]}:\Lambda^{[111]}=1.50:1.08:1$. 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 [20,63] была использована концепция дефектного поверхностного слоя, предложенного в работах [32,87,88]. Дело в том, что для обеспечения диффузного рассеяния фононов поверхность образца перед измерением обрабатывалась наждаком. При такой обработке непосредственно под поверхностью образца формируется дефектный слой, включающий микротрещины с соответствующими полями деформаций и сеть дислокаций [88]. 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 изо-

топическом беспорядке. Как будет показано в разделе 3.3, учет этого механизма позволит согласовать результаты расчета теплопроводности с экспериментом в интервале температур от 3 до 15 К в пределах погрешности эксперимента. Поэтому в нашем случае роль дефектного поверхностного слоя оказалась малой и его влиянием можно пренебречь.

2.4. ВЛИЯНИЕ ФОКУСИРОВКИ НА ФОНОННЫЙ ТРАНСПОРТ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ С ПРЯМОУГОЛЬНЫМ СЕЧЕНИЕМ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Рассмотрим фононный транспорт в образцах кремния конечной длины с прямоугольным сечением при температурах, гораздо меньших температуры Дебая. Рассчитаем угловые зависимости длин свободного пробега фононов в режиме кнудсеновского течения, когда рассеяние фононов на границах является доминирующим. Сравним полученные результаты с экспериментальными данными [19] для образцов кремния с прямоугольным сечением $W \times D$ ($D=0.185$ см, $W=\mu D=0.638$ см, $\mu = 3.45$) и длиной $L=3.5$ см. Длины свободного пробега фононов нормируем на толщину образца:

$$\hat{\Lambda}(\psi) = \Lambda(\psi) / D. \quad (2.58)$$

Определим систему координат, связанную с образцом, следующим образом: направим ось «3» вдоль оси образца и направления теплового потока, а ось вращения, обозначим как ось «1» (см. рис. 2.7). Оси «1» и «2» перпендикулярны боковым граням образца. Рассмотрим вращение градиента температуры в плоскости грани куба в двух случаях:

(А) Ось вращения перпендикулярна узкой грани образца.

$$V_{g3}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda} \sin \psi + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda}, \quad V_{g2}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda} \cos \psi - V_{gz}^{\lambda} \sin \psi; \quad (2.59)$$

(Б) Ось вращения перпендикулярна широкой грани образца.

$$V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda} \sin \psi + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda} \cos \psi + V_{gz}^{\lambda} \sin \psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda}, \quad (2.60)$$

Здесь V_{g3}^λ , V_{g2}^λ и V_{g1}^λ – проекции групповой скорости на направленные градиента температуры, и боковые грани образца, соответственно. Угол ψ задает отклонение потока тепла от оси Z.

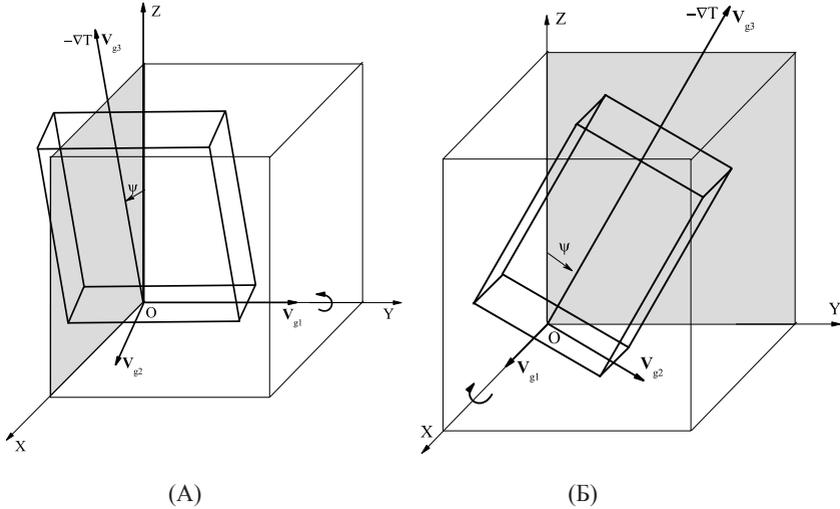


Рис. 2.7. Схема, иллюстрирующая вращение градиента температуры в плоскости грани куба для случаев: (А) Ось вращения перпендикулярна узкой грани образца. (Б) Ось вращения перпендикулярна широкой грани образца

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. 2.8а). Поэтому угловые зависимости средних длин свободного пробега фононов и, соответственно, теплопроводности для случаев вращения узкой грани образца и широкой грани образца из-за эффекта фокусировки фононов значительно отличаются как между собой, так и от полученной для образцов с квадратным сечением (см. рис. 2.8, кривые 1b, 1a и 1). При вращении потока тепла в широкой грани прямоугольника {100} отношение длин свободного пробега $\Lambda_{[100]}^{(100)} / \Lambda_{[110]}^{(100)}$ составляет 1.21 и оказывается меньше, чем для образцов с квадратным сечением, для которых отношение $\Lambda_{[100]}^{(100)} / \Lambda_{[110]}^{(100)} \cong 1.4$. Однако при вращении потока тепла в узкой грани

прямоугольника анизотропия теплопроводности возрастает. В этом случае она оказывается больше, чем для образцов с квадратным сечением: отношение $\Lambda_{[100]}^{\{100\}} : \Lambda_{[110]}^{\{100\}} \cong 1.57$ (рис. 2.8а, кривая 1а). Из рисунка 2.8а видно, что значения средних длин свободного пробега фононов,

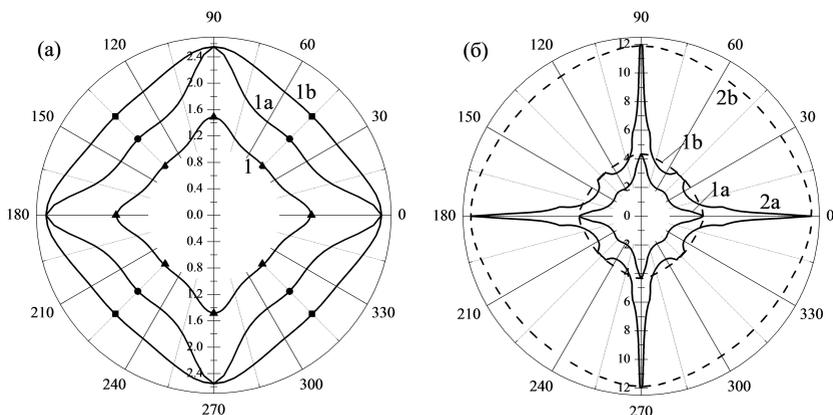


Рис. 2.8. Угловые зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}(\psi)$ в кристаллах Si в случае, когда поток тепла вращается в плоскости грани куба $\{100\}$. (а): кривая 1 для образцов [19] с квадратным сечением ($D=0.293$ см, $L=2.9$ см); кривые 1а и 1б - для образцов [19] с прямоугольным сечением ($L=3.5$ см, $D=0.185$ см, $\mu D=0.638$ см); кривая 1а – вращение в узкой грани образца; кривая 1б – вращение в широкой грани образца. Символы – экспериментальные данные [19]; (б): для образцов толщиной $D=0.185$ см и длиной $L=5.5 \mu\text{D}$; $\mu=10$ (кривые 1а, 1б), $\mu=100$ (кривые 2а, 2б). Вращение градиента температур в узкой (кривые 1а и 2а) и в широкой (кривые 1б и 2б) грани образца $\{100\}$

рассчитанные в работе [21] для образцов с прямоугольным сечением в направлении $[101]$, хорошо согласуются с экспериментальными данными [19]. Следует отметить интересный экспериментальный результат: для образцов с прямоугольным сечением величины теплопроводности (и длин свободного пробега) зависят не только направления градиента температуры, но и от ориентации широких граней образца [19]. Для двух одинаковых образцов и направлением градиента температуры $[110]$, 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 $\{001\}$ [19]. Наш расчет [21] с использованием формул (2.38) и (2.40) дает для этого отношения, $\Lambda_{[110]}^{\{100\}} : \Lambda_{[110]}^{\{110\}} \cong 1.30$, что хорошо согласуется с данными [19].

Рассмотрим, как изменится это отношение при увеличении ширины образца. Для этого зафиксируем толщину образца $D=0.185$ см и соотношение длины и ширины: $L = 5.49W=5.49\mu D$. Затем проанализируем теплопроводность и длины пробега фононов для значений $\mu=10$ и 100 . Как видно из рисунка 2.8б, угловые зависимости средних длин свободного пробега для двух рассматриваемых случаев качественно изменяются (см. рис. 2.8б). При вращении потока тепла в широкой грани прямоугольника увеличение параметра μ приводит к изотропизации зависимости $\Lambda^{\{100\}}(\psi)$, и при $\mu=100$ она становится почти изотропной. В противоположность этому вращение потока тепла в узкой грани прямоугольника приводит к увеличению анизотропии теплопроводности (см. рис. 2.8б). Отношение длин пробега $\Lambda_{[100]}^{\{100\}}(\psi) : \Lambda_{[110]}^{\{100\}}(\psi)$ возрастает до значений 1.9 и 3.0 при $\mu=10$ и 100 , соответственно. В направлениях типа $[100]$ для обоих вариантов вращения потока тепла длины пробега совпадают. Однако отношение теплопроводностей двух одинаковых образцов в направлении $[110]$ с ориентациями широких граней $\{001\}$ и $\{110\}$ при $\mu=10$ и 100 будут равны 1.7 и 2.8, соответственно. Поскольку зависимость $\Lambda^{\{100\}}(\psi)$ при вращении в широкой грани образца становится почти изотропной при больших значениях μ , то эти отношения мало отличаются от $\Lambda_{[100]}^{\{100\}}(\psi) : \Lambda_{[110]}^{\{100\}}(\psi)$.

Достаточно интересно (см. рис. 2.9) по сравнению с образцами квадратного сечения выглядят угловые зависимости теплопроводности и, соответственно, длин свободного пробега фононов $\hat{\Lambda}(\psi)$ в случае, когда ось вращения и градиент температуры совпадают с осью Z , а вращение происходит в плоскости XY . В этом случае компоненты групповой скорости фононов, параллельные и перпендикулярные потоку тепла, определяются выражениями:

$$V_{g3}^{\lambda} = V_{gz}^{\lambda}, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda} \cos \psi + V_{gy}^{\lambda} \sin \psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = -V_{gx}^{\lambda} \sin \psi + V_{gy}^{\lambda} \cos \psi, \quad (2.61)$$

где ψ – угол между осью X и боковой гранью. В этом случае для образцов с квадратным сечением средние длины свободного пробега фононов с точностью до 1.3% изотропны (см. рис. 2.9 а, кривая 1). Однако увеличение ширины пластины приводит к увеличению значений и анизотропии длин пробега. Как видно из рисунка 2.9а, максимальные значения длин пробега достигаются в направлениях $[100]$. С ростом параметра μ от 1 до 100 максимальные значения теплопроводности и сред-

ней длины свободного пробега фононов увеличиваются на порядок величины (см. рис. 2.9 а, кривые 1 и 3). В направлениях типа $[101]$ имеет место локальный максимум, а минимальное значение достигается при углах $\psi = (\pi/2)n \pm \pi/6$, где n – целое число. При этом отношение длин пробега фононов в симметричных направлениях $\Lambda_{[100]}^{[100]} / \Lambda_{[110]}^{[100]}$ возрастает от 1.2 при $\mu = 10$ до 1.9 при $\mu = 100$. Как следует из рисунка 2.9б, в направлениях типа $[100]$ длина свободного пробега быстрой поперечной моды достигает максимальных значений и обеспечивает максимум теплопроводности. Увеличение параметра μ от 10 до 100 приводит к возрастанию $\Lambda_{[100]}^{[100]}(\mu)$ в четыре раза. Длина свободного пробега медленной поперечной моды достигает максимальных значений в направлениях типа $[101]$ и обеспечивает локальный максимум теплопроводности в этом направлении.

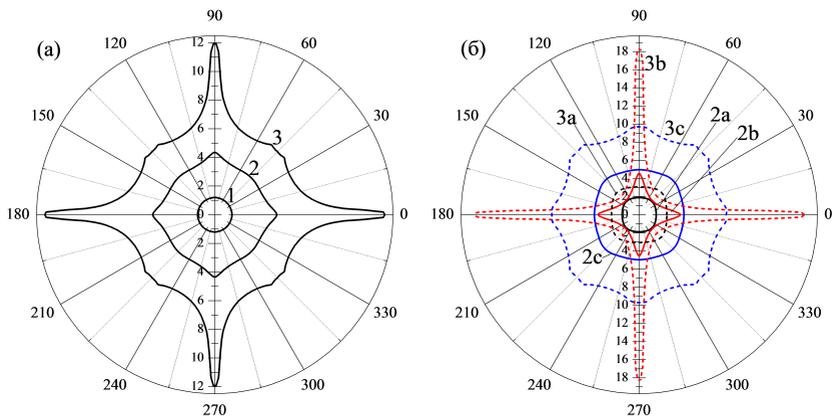


Рис. 2.9. Угловые зависимости $\tilde{\Lambda}(\psi)$ и $\tilde{\Lambda}^\lambda(\psi)$ для образцов с осью вращения и градиентом температуры в направлении $[100]$. Длина образцов $L = 5.49\mu D$, $W = \mu D$, a толщина $D = 0.185$ см. (а): $\tilde{\Lambda}(\psi)$ для $\mu = 1$ (кривая 1), $\mu = 10$ (кривая 2) и $\mu = 100$ (кривая 3). (б): $\tilde{\Lambda}^\lambda(\psi)$ для продольной моды (кривые 2а, 3а), для быстрой (кривые 2б, 3б) и медленной (кривые 2с, 3с) поперечной моды. Кривые 2а, 2б, 2с для $\mu = 10$ и кривые 3а, 3б, 3с для $\mu = 100$

Итак, проведенный анализ показал, что анизотропия теплопроводности (средних длин свободного пробега фононов) для образцов с прямоугольным сечением может значительно отличаться от образцов с квадратным сечением. В отличие от образцов с квадратным сечением

значения теплопроводности и длин пробега фононов при низких температурах для достаточно широких образцов с прямоугольным сечением в значительной степени определяются ориентацией широкой грани образца относительно осей кристалла. Наиболее существенно изменяются длины свободного пробега фононов быстрой и медленной поперечных мод.

2.5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты главы 2 могут быть сформулированы следующим образом:

1. Дано 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. Показано, что при низких температурах длины свободного пробега фононов в образцах с квадратным и круглым сечениями для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях 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. 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. Однако 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 [19] показали, что при низких температурах, когда длина свободного пробега фононов оказывается больше поперечного размера образца, фокусировка фононов приводит к двум эффектам в теплопроводности кристаллов Si. Первым эффектом является зависимость теплопроводности образцов с квадратным сечением от направления градиента температуры относительно кристаллографических осей. Вторым эффектом является зависимость величин теплопроводности образцов Si с прямоугольным сечением от ориентации широких граней. Для двух исследованных в [19] образцов с прямоугольным сечением, имеющих одинаковые геометрические параметры и направление градиента температуры [110] теплопроводность образца с широкой гранью {001} и узкой {110} при низких температурах оказалась на 33% выше, чем для образца с широкой гранью {110} и узкой {001}.

Теплопроводность в работе [19] (как и в ряде других работ) измерялась методом стационарного продольного теплового потока [35,89]. Перед измерением теплопроводности объёмные образцы кремния в работе [19] предварительно обрабатывались наждаком для того, чтобы обеспечить диффузное рассеяние фононов на границах. В типичном эксперименте (см., например, [87]) нагреватель приклеивался прямо к торцу образца, а противоположный конец зажимался в хладостоеке. Термометры закреплялись на расстоянии L друг от друга, и измерялась разность показаний ΔT (см. рис. 3.1). После установления стационарного состояния распределения температур коэффициент теплопроводности κ определяется делением тепловой мощности ΔQ , выделяемой в нагревателе, на площадь поперечного сечения образца S_c 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 значение теплопроводности соответствует средней температуре между термометрами. 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 работе [22] показано, что для корректного учета этих эффектов при расчете скоростей релаксации фононов на границах монокристаллических образцов следует ввести два ориентационных параметра, которые учитывают зависимости релаксационных характеристик от направления теплового потока $[I]$ и ориентации широкой грани образца $\{J\}$ относительно кристаллографических осей. Поэтому в отличие от изотропной среды, при расчете кинетических характеристик монокристаллических

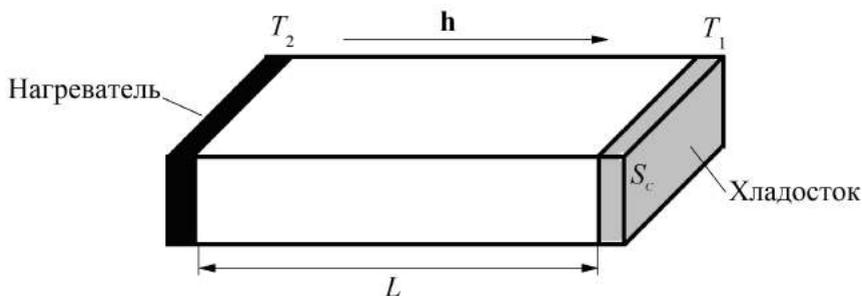


Рис. 3.1. Принципиальная схема для измерения теплопроводности методом стационарного продольного теплового потока

образцов мы должны учесть их зависимость от ориентационных параметров

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

Далее будет показано, что ориентационные параметры: направление теплового потока $[I(\psi)]$ и плоскость $\{J\}$, в которой изменяется угол ψ , могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока. Предложенный метод учета фокусировки фононов является актуальным, поскольку в значительном числе публикаций, посвященных исследованию фононного транспорта как в объёмных монокристаллах, так и в наноструктурах [5-7,25,26,37,90], эти эффекты не учитывались.

В разделе 3.1 рассмотрено влияние нормальных процессов фон-фон-фононного рассеяния на решеточную теплопроводность кубиче-

ских кристаллов в трехмодовой модели Каллавея с учетом анизотропии упругой энергии. В разделе 3.2 развит метод учета фокусировки фононов при расчете температурных зависимостей теплопроводности монокристаллических образцов. В разделе 3.3 показано, что использование рассчитанных нами времен релаксации фононов на границах [20, 21] позволяет адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности кристаллов кремния для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образца. В разделе 3.4 проанализировано изменение анизотропии теплопроводности с температурой. В разделе 3.5 дана физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности кубических кристаллов.

3.1. НОРМАЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ ФОНОН-ФОНОННОГО РАССЕЯНИЯ И РЕШЕТОЧНАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

Рассмотрим влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на решеточную теплопроводность кубических кристаллов с учетом фокусировки фононов. Система кинетических уравнений для неравновесных функций распределения фононов N_q^λ в трехмодовой модели Каллавея имеет вид [91-94]:

$$\mathbf{v}_g^\lambda(\mathbf{q}) \cdot \nabla_r N_q^\lambda = -(N_q^\lambda - N_{q\lambda}^{(0)})v_R^\lambda - (N_q^\lambda - N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_\lambda))v_N^\lambda. \quad (3.1)$$

Здесь $v_N^\lambda(\mathbf{q})$ и $v_R^\lambda(\mathbf{q})$ - скорости релаксации фононов в нормальных (N-процессах) и резистивных процессах рассеяния. Резистивные процессы рассеяния приводят к релаксации импульса фононной системы. К ним относятся рассеяние фононов на фононах в процессах переброса – $v_U^\lambda(\mathbf{q})$, на дефектах – $v_{iso}^\lambda(\mathbf{q})$ и границах образца $v_{B\{I(\psi)\}}^{\lambda\{J\}}$, поэтому $v_{R\{I(\psi)\}}^{\lambda\{J\}} = v_{B\{I(\psi)\}}^{\lambda\{J\}} + v_{iso}^\lambda(\mathbf{q}) + v_U^\lambda(\mathbf{q})$. Роль N-процессов фонон-фононного рассеяния в теории решеточной теплопроводности достаточно хорошо изучена [9,36,91-96]. В этих процессах импульс фононов, участвующих в столкновениях, сохраняется. Поэтому N-процессы не дают непосредственного вклада в релаксацию импульса фононов и, соответственно, в теплосопrotивление. Однако они перераспределяют энер-

гию и импульс между различными фононными модами и стремятся установить дрейфовое локально-равновесное распределение, которое описывается смещенной функцией Планка [91-94]:

$$N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_\lambda) = \left(\exp \left(\frac{\hbar \omega_q^\lambda - \hbar \mathbf{q} \mathbf{u}_\lambda}{k_B T} \right) - 1 \right)^{-1} \cong N_{q\lambda}^0 + \frac{\hbar \mathbf{q} \mathbf{u}_\lambda}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1), \quad (3.2)$$

где $N_{q\lambda}^0$ - функция Планка. В этом случае неравновесная система фононов описывается девятью параметрами: скоростями релаксации нормальных и резистивных процессах рассеяния, а также средними скоростями дрейфа \mathbf{u}_λ для каждой ветви фононного спектра. Учет особой роли N-процессов необходим в условиях, когда частота релаксации фононов $\nu_N^\lambda(q)$ будет больше, либо сравнима с частотой релаксации в резистивных процессах рассеяния [91-94]. В противоположном случае их можно учитывать аддитивно с резистивными процессами рассеяния, как это сделано в [97].

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

$$g_\lambda(\mathbf{q}) = - \frac{N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \frac{\hbar \omega_q^\lambda}{k_B T^2} (\mathbf{V}_g^\lambda \nabla_r T) + \frac{\hbar \mathbf{q} \mathbf{u}_\lambda}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \frac{\nu_N^\lambda(q)}{\nu^\lambda(q)} = g_\lambda^{diff}(\mathbf{q}) + g_\lambda^{dr}(\mathbf{q}). \quad (3.3)$$

Первый член в выражении (3.3) определяется диффузионным движением фононов под действием градиента температуры. Второй член определяется дрейфовым движением фононов и обусловлен нормальными процессами фонон-фононного рассеяния. Для нахождения скоростей дрейфа \mathbf{u}_l система кинетических уравнений (3.1) должна быть дополнена уравнением баланса импульса фононов, которое получается путем умножения уравнения (3.1) на вектор импульса фононов $\hbar \mathbf{q}$ и суммирования по всем векторам \mathbf{q} .

$$\frac{1}{V} \sum_{q,\lambda} \hbar \mathbf{q} \nu_N^\lambda(q) \frac{N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)}{k_B T \nu^\lambda(q)} \left[\frac{\hbar \omega_q^\lambda}{T} (\mathbf{V}_g^\lambda \nabla_r T) + \hbar (\mathbf{q} \mathbf{u}_\lambda) \nu_R^\lambda(q) \right] = 0. \quad (3.4)$$

В [94] показано, что решение уравнений (3.4) может быть найдено для двух предельных случаев. (1) Если в N-процессах доминируют механизмы релаксации с перераспределением импульса между фононами различных поляризацій, то они стремятся установить одинаковую ско-

рость дрейфа для всех фононов. В этом случае скорость дрейфа $\mathbf{u}^{(2)} = \mathbf{u}^{(1)}$ должна быть одинаковой для всех поляризации. (2) Если импульс фононов перераспределяется только внутри каждой колебательной ветви, то фононы каждой моды релаксируют независимо, и мы возвращаемся фактически к исходной одномодовой модели Каллавея [91]. Этот вариант релаксации рассмотрен в работе [95] и получил название обобщенной модели Каллавея. В этом случае скорости дрейфа будут различными для фононов различных поляризаций $\mathbf{u}_L^{(2)} \neq \mathbf{u}_t^{(2)}$.

К первому типу N-процессов относятся механизмы релаксации Херринга [38] и Ландау-Румера [98], а также ряд других процессов. В механизме Херринга [38] слияние продольного фонона с медленным поперечным фононом (ST) порождает быстрый фонон (FT) ($L_1 + ST_2 \rightarrow FT_3$):

$$v_N^L \cong B_{LTT} T^3 \omega_L^2 \quad (3.5)$$

Согласно [9,36,94-97] основным механизмом релаксации поперечных фононов в N-процессах рассеяния является механизм Ландау-Румера [98], в котором слияние поперечного и продольного фононов порождает продольный фонон ($T_1 + L_2 \rightarrow L_3$)

$$v_N^L \cong B_{TLL} T^4 \omega_t. \quad (3.6)$$

Этот вариант релаксации фононов в N-процессах рассеяния и его роль в теплопроводности были проанализированы в [94]. Для второго типа N-процессов Саймонс [99] показал, что N-процессы второго типа ($L_1 + L_2 \rightarrow L_3$, $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$) в изотропных средах могут происходить только при учете затухания фононных состояний, причем, в них могут принимать участие только коллинеарные фононы. Однако в работах [100] показано, что учет кубической анизотропии приводит к выполнению закона сохранения энергии в механизмах релаксации с участием поперечных фононов (TTT), и эти механизмы в длинноволновом приближении вносят значительно больший вклад в релаксацию поперечных фононов, чем механизм Ландау-Румера. Для механизма TTT скорость релаксации v_N^L определяется также выражением типа (3.6), но с коэффициентом B_{TTT}^N вместо B_{TLL}^N . Итак, в первом варианте N-процессов скорость дрейфа не зависит от поляризации фононов, а во втором случае закон сохранения импульса выполняется для каждой из ветвей фононного спектра.

Заметим, что в модели изотропной среды направления групповой и фазовой скорости совпадают, поэтому диффузионное и дрейфовое слагаемые в функции $g_\lambda(\mathbf{q})$ могут быть объединены и введена эффективная частота релаксации фононов [94]:

$$g_\lambda(\mathbf{q}) = -\frac{N_{q\lambda}^0(N_{q\lambda}^0 + 1)}{\tilde{v}_{ph\lambda}^\lambda(q)} \frac{\hbar\omega_q^\lambda}{k_B T^2} (\mathbf{v}_q^\lambda \nabla T), \quad \tilde{v}_{ph\lambda}^{\lambda(1,2)}(q) = v_{ph\lambda}^\lambda(q) \left(1 + \frac{v_N^\lambda(q)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^2} B^{(1,2)}(T) \right)^{-1}. \quad (3.7)$$

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 с учетом фокусировки фононов дает [23]:

$$g_\lambda^{(1,2)}(\mathbf{q}) = -k_B \frac{N_{q\lambda}^0(N_{q\lambda}^0 + 1)}{k_B T v^\lambda(q)} \left(\frac{\hbar\omega_q^\lambda}{k_B T} \right) \left[(\mathbf{v}_g^\lambda \nabla_r T) + \left(\frac{\mathbf{q}}{q} \right) \nabla_r T \right] \frac{v_N^\lambda(q)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))} B^{(1,2)}(T) = g_\lambda^{diff}(\mathbf{q}) + g_\lambda^{dr}(\mathbf{q}), \quad (3.8)$$

$$\mathbf{u}^{(1,2)} = -k_B \nabla_r T B^{(1,2)}(T) / k_B T.$$

Коэффициенты $B^{(1,2)}(T)$ при учете дисперсии тепловых фононов имеют вид [23]:

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

$$\Psi_N^\lambda = 3 \int_{-1}^1 \cos \theta d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi (y)^4 \int_0^1 \frac{V_{g\lambda}^\lambda z^3 x^3}{(sh(z^\lambda/2))^2 v^\lambda} dx, \quad \Psi_{NR}^\lambda = \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi (y)^5 \int_0^1 \frac{x^4}{(sh(z^\lambda/2))^2 v^\lambda} dx, \quad (3.9)$$

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

Максимальный волновой вектор $q_{\max}(\theta, \varphi)$ определен выражением (1.44). Итак, неравновесные функции распределения фононов в трехмодовой модели Каллавея могут быть представлены в виде аддитивной суммы диффузионного и дрейфового движения фононов.

3.2. МЕХАНИЗМЫ РЕЛАКСАЦИИ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ

В отличие от ранее выполненных исследований теплопроводности объёмных материалов в модели изотропной среды [9,36,91-96] при ана-

лизе фононного транспорта в монокристаллических образцах Si мы учитываем фокусировку фононов и обусловленную ей зависимость теплопроводности от направления теплового потока $[I(\psi)]$ и ориентации широкой грани образца относительно осей кристалла $\{J\}$. В трехмодовой модели Каллавея её можно представить в виде аддитивной суммы диффузионного $\kappa_{dif}^{\{J\}}[I(\psi)]$ и дрейфового $\kappa_{dr}^{\{J\}}[I(\psi)]$ вкладов [23]:

$$\kappa_{dif}^{\{J\}}(T) = \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^{\lambda})^2 z_{\lambda}^2 x^2}{V_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} (sh(z_{\lambda}/2))^2} dx, \quad (3.10)$$

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

$$B_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = \sum_{\lambda} \Psi_{N[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} / \sum_{\lambda} \Psi_{NR[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}, \quad (3.11)$$

$$\Psi_{N[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = 3 \int_{-1}^1 \cos\theta d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^4 \int_0^1 \frac{V_{gz}^{\lambda} x^3 z_{\lambda}}{(sh(z_{\lambda}/2))^2} \frac{V_N^{\lambda}}{V_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}} dx,$$

$$\Psi_{NR[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^5 \int_0^1 \frac{x^4}{(sh(z_{\lambda}/2))^2} \frac{V_N^{\lambda} V_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}}{V_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}} dx.$$

Здесь $z_{\lambda} = \hbar\omega_q^{\lambda} / k_B T$, $x = \frac{q}{q_{\max}(\theta, \varphi)}$, $y(T, \theta, \varphi) = \frac{q_{\max}(\theta, \varphi)}{q_T}$, $q_{\max}(\theta, \varphi)$ –

максимальный волновой вектор (см. формулу (1.44)), углы (θ, φ) определяют направление волнового вектора фонона, V_{g3}^{λ} и V_{gz}^{λ} – проекции групповой скорости на направление градиента температуры и ось Z, соответственно, ω_q^{λ} – частота фонона с поляризацией λ при учете дисперсии тепловых фононов, $V_{[J(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = V_{[J(\psi)]R}^{\lambda\{J\}}(q) + V_N^{\lambda}(q)$ – полная скорость релаксации фононов. Скорости релаксации фононов в резистивных $V_{[I(\psi)]R}^{\lambda\{J\}}$ и нормальных $V_N^{\lambda}(q)$ процессах релаксации определены в разделе 3.1. Резистивные процессы рассеяния приводят к диффузионному вкладу в теплопроводность, а нормальные процессы фонон-фононного рассеяния обеспечивают дрейфовый вклад в теплопроводность. Для расчета температурных зависимостей теплопроводности объёмных образцов кремния используется аппроксимационный спектр

фононов [63] (см. раздел 1.2). При этом спектр фононов для симметричных направлений, определенный из данных по неупругому рассеянию нейтронов [61,62], аппроксимировался полиномом седьмой степени по приведенному волновому вектору фонона x , а при экстраполяции спектра на всю зону Бриллюэна, использовалось разложение по кубическим гармоникам (см. 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. (1.28)).

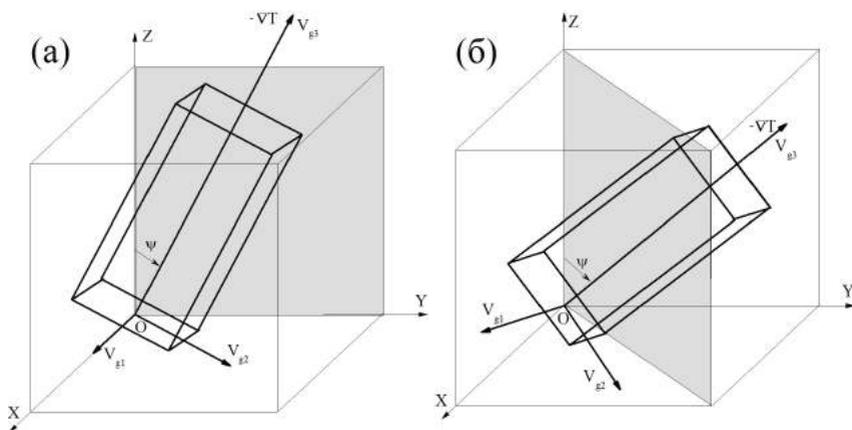


Рис. 3.2. Схема, иллюстрирующая изменение угла ψ при вращении градиента температуры: (а) - в плоскости грани куба ZY ($\{J\}=\{100\}$) и (б) - в диагональной плоскости ($\{J\}=\{110\}$). V_{g1}^λ , V_{g2}^λ и V_{g3}^λ - компоненты групповой скорости

Проанализируем фононный транспорт в образцах длины L , имеющих прямоугольное сечение со сторонами D (толщина) и $W = \mu D$ (ширина). Для образцов с квадратным сечением $\mu = 1$. Для учета влияния фокусировки фононов на анизотропию теплопроводности монокристаллических образцов достаточно выразить ориентационные параметры через компоненты групповой скорости. Этими параметрами являются направление потока тепла $[I(\psi)]$ и ориентация плоскости $\{J\}$, в которой угол ψ отсчитывается от оси Z .

Для этого рассмотрим вращение потока тепла в двух симметричных плоскостях: (1) широкая грань образца совпадает с плоскостью грани куба $\{J\}=\{100\}$, (2) широкая грань образца совпадает с диагональной плоскостью $\{J\}=\{110\}$ (см. рис. 3.2). Определим систему координат, связанную с образцом: ось «3» направим вдоль оси образца, которое совпадает с направлением теплового потока. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно широкой грани образца или одной из граней для образцов с квадратным сечением. Она определяет ориентацию плоскости $\{J\}$. Ось «2» направим перпендикулярно узкой грани образца. Учтем, что спектр фононов определен в системе координат по ребрам куба. Тогда компоненты групповой скорости фононов в принятой системе координат для рассматриваемых случаев могут быть представлены в виде:

$$(1) V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda} \sin\psi + V_{gz}^{\lambda} \cos\psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda} \cos\psi + V_{gz}^{\lambda} \sin\psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda}, \quad (3.12a)$$

$$(2) V_{g3}^{\lambda} = (V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) \sin\psi / \sqrt{2} + V_{gz}^{\lambda} \cos\psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = (V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) \cos\psi / \sqrt{2} - V_{gz}^{\lambda} \sin\psi, \quad (3.12b)$$

$$V_{g1}^{\lambda} = (V_{gx}^{\lambda} - V_{gy}^{\lambda}) / \sqrt{2},$$

Из рисунка 3.2 видно, что для сечения кубического кристалла $\{J\}$ зависимость направления потока тепла от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^{λ} . Проекция компоненты V_{g1}^{λ} не зависит от угла ψ , поскольку является осью вращения. Она определяет плоскости $\{J\}$ (широкую грань образца). Компонента V_{g2}^{λ} зависит от угла ψ и определяет ориентацию двух других граней образца. Для исследованных в работе [19] образцов с прямоугольным сечением имеем: в первом случае, когда широкая грань образца совпадает с $\{100\}$, узкая - с $\{110\}$, а градиент температур направлен вдоль $[110]$, соответствует выражению (3.12a) с углом $\psi = \pi/4$ (см. рис. 3.2a). Тогда для компонент V_{gi}^{λ} имеем

$$V_{g3}^{\lambda} = (-V_{gy}^{\lambda} + V_{gz}^{\lambda}) / \sqrt{2}, \quad V_{g2}^{\lambda} = (V_{gy}^{\lambda} + V_{gz}^{\lambda}) / \sqrt{2}, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda}. \quad (3.13a)$$

Во втором случае, когда широкая грань совпадает с $\{110\}$, а узкая с $\{100\}$, а градиент температур направлен вдоль $[110]$, соответствует выражению (3.12b) с углом $\psi = \pi/2$. Тогда для компонент V_{gi}^{λ} имеем

$$V_{g3}^{\lambda} = (V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) / \sqrt{2}, \quad V_{g2}^{\lambda} = -V_{gz}^{\lambda}, \quad V_{g1}^{\lambda} = (V_{gx}^{\lambda} - V_{gy}^{\lambda}) / \sqrt{2}. \quad (3.13b)$$

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 теплового потоку. Компоненты групповой скорости фононов, необходимые для расчета температурных зависимостей теплопроводности, в декартовой системе координат имеют вид

$$\begin{aligned} V_{gx}^\lambda(x, \theta, \varphi) &= S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \theta \cos \varphi + S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi) \cos \theta \cos \varphi - S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \varphi\}, \\ V_{gy}^\lambda(x, \theta, \varphi) &= S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \theta \sin \varphi + S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi) \cos \theta \sin \varphi + S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi) \cos \varphi\}, \quad (3.14) \\ V_{gz}^\lambda(x, \theta, \varphi) &= S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \cos \theta - S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \theta\}. \end{aligned}$$

Функции $V_n^\lambda(x, \theta, \varphi)$, $S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi)$ и $S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi)$ являются компонентами групповой скорости фононов в сферической системе координат, нормированные на фазовую скорость (см. [63]). Учет дисперсии фононов приводит к тому, что групповая скорость, а также скорости релаксации уже зависят не только от углов ψ, θ, φ , но и от приведенного волнового вектора фонона x , т.е. $\mathbf{V}_g^\lambda = \mathbf{V}_g^\lambda(x, \psi, \theta, \varphi)$ и $v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi)$.

Влияние фокусировки на теплопроводность определяется рассеянием фононов на границах. Скорости релаксации фононов в этом механизме выражаются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами $k_0 = L/2D$ и $\mu = W/D$. Для потока тепла в направлении $[I(\psi)]$, где угол ψ отсчитывается от оси Z в плоскости $\{J\}$ она может быть представлена в следующем виде [22]:

$$\begin{aligned} v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi) &= \frac{|V_{g3}^\lambda|}{k_0 D} \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{(|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{\mu |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2}{3} \frac{|V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{\mu (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}^{-1}, \quad (3.15) \\ k_0 &= \frac{L}{2D} \end{aligned}$$

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 $|V_{g3}^\lambda|/|V_{g2}^\lambda| \geq k_0/\mu$.

При выполнении противоположных неравенств имеем:

$$v_{B[I]}^{\lambda, I}(x, \theta, \varphi) = v_{B \neq [I]}^{\lambda, I}(x, \theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{6\mu}{D} \frac{(V_{g1}^\lambda)^2}{(3\mu|V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|)}, & \text{если } |V_{g2}| < \mu|V_{g1}| \mu|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0; \\ \frac{6}{\mu D} \frac{(V_{g2}^\lambda)^2}{(3|V_{g2}^\lambda| - \mu|V_{g1}^\lambda|)}, & \text{если } |V_{g2}| > \mu|V_{g1}| \mu|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < \frac{k_0}{\mu}. \end{cases} \quad (3.16)$$

Зависимости теплопроводности от направления градиента температуры $[I(y)]$ и ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла $\{J\}$ определяются величинами компонент групповой скорости фононов. Они входят непосредственно в теплопроводность и в скорости релаксации $v_{B[I(y)]}^{\lambda, I}$.

Выражение для скорости релаксации фононов на изотопическом беспорядке в кубических кристаллах, согласно [101-104], имеет вид:

$$v_{iso}(q_1, \lambda_1) = \frac{\pi}{6} g V_0 (\omega_{q_1}^{\lambda_1})^2 D(\omega_{q_1}^{\lambda_1}), \quad D(\omega_{q_1}^{\lambda_1}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}_2, \lambda_2} \delta(\omega_{q_1}^{\lambda_1} - \omega_{q_2}^{\lambda_2}). \quad (3.17)$$

Здесь V_0 – объем, приходящийся на один атом, g – фактор изотопического беспорядка $g = \sum_i C_i (\Delta M_i / \bar{M})^2$, где $\Delta M = M_i - \bar{M}$, 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 (3.17) можно представить в виде [104]:

$$v_{iso}^\lambda \cong A_{iso} (T \cdot z_\lambda)^4,$$

$$A_{iso}^\lambda = \frac{g V_0}{12\pi} (k_B / \hbar)^4 \langle (S_0^\lambda)^{-3} \rangle, \quad \langle (S_0^\lambda)^{-3} \rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega (S_0^\lambda(\theta, \varphi))^{-3}, \quad (3.18)$$

$$A_{iso} = \begin{cases} A_{iso}^L + A_{iso}^{I1} + A_{iso}^{I2} = 0.46, & \text{если } \omega \leq \omega_{\max}^{I2}; \\ A_{iso}^L + A_{iso}^{I1} = 0.21, & \text{если } \omega_{\max}^{I2} < \omega \leq \omega_{\max}^{I1}; \\ A_{iso}^L = 0.04, & \text{если } \omega_{\max}^{I1} < \omega \leq \omega_{\max}^L; \\ 0, & \text{если } \omega > \omega_{\max}^L. \end{cases}$$

Величина параметра изотопического беспорядка $g = 2.01 \cdot 10^{-4}$ для Si^{nat} с природным составом изотопов. При учете дисперсии фононов плотность фононных состояний $D(\omega)$ может быть определена из вида аппроксимационного спектра (см. раздел 1.2).

Выражение для скорости релаксации фононов в процессах переброса, согласно [9,36,38,91,94-97], имеет вид

$$v_U^\lambda = A_U^\lambda \cdot z_\lambda^2 \cdot T^3 \cdot \exp\left(-\frac{C_U^\lambda}{T}\right). \quad (3.19)$$

Параметры ангармонического рассеяния A_U^λ , C_U^λ для скорости релаксации фононов в процессах переброса являются подгоночными параметрами. Они определяются из сопоставления результатов расчета температурных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными. Согласно общепринятым представлениям [9,36,97] основными механизмами N-процессов рассеяния в кристаллах Si являются механизмы релаксации Херринга [38] для продольных фононов и механизм Ландау-Румера [98] для поперечных фононов (см. формулы (3.5) и (3.6)). В этих процессах импульс фононов перераспределяется между различными колебательными ветвями, поэтому мы будем пользоваться первым вариантом N-процессов рассеяния для нахождения скоростей дрейфа (см. формулы (3.8)). Из сопоставления результатов расчета температурных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными [19] получены параметры, определяющие скорости релаксации фононов в ангармонических процессах фонон-фононного рассеяния (таблица 3.1).

Таблица 3.1

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

| $A_N^L, \text{K}^{-5}\text{c}^{-1}$ | $A_N^t, \text{K}^{-5}\text{c}^{-1}$ | $A_u^L, \text{K}^{-3}\text{c}^{-1}$ | $A_u^t, \text{K}^{-3}\text{c}^{-1}$ | C_u^L, K | C_u^t, K |
|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------|-------------------|
| 0.8 | $2.0 \cdot 10^{-3}$ | $2.0 \cdot 10^3$ | $0.70 \cdot 10^3$ | 310 | 98 |

При значениях подгоночных параметров для кристаллов Si в таблице 3.1 частота релаксации поперечных фононов в N-процессах на два порядка меньше, чем для продольных. Нетрудно убедиться, что во

всей температурной области для поперечных фононов выполняется неравенство $v'_N(q) < v'_R(q)$, и их вклад в теплопроводность определяется диффузионным движением. Для продольных фононов отношение скоростей релаксации $v^L_N/v^L_R < 1$ в интервале температур $1 < T < 12$ К меньше единицы, однако при более высоких температурах оно оказывается больше единицы. Поэтому для них необходимо оценить вклад дрейфового движения фононов в теплопроводность аналогично тому, как это сделано в работах [94].

3.3. АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ОБРАЗЦОВ КРЕМНИЯ С КВАДРАТНЫМ И ПРЯМОУГОЛЬНЫМ СЕЧЕНИЯМИ

Ниже приведены результаты расчёта теплопроводности $\kappa(T)$, согласно формулам (3.10)-(3.19), для образцов кремния конечной длины с квадратным и прямоугольным сечениями, исследованных в работе [19]. Для граничного рассеяния подгоночные параметры не использовались. 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 [91,94-97,85], приведены в таблице 3.1. Прежде всего, рассмотрим влияние различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si для значений подгоночных параметров, приведенных в таблице 3.1. Для этого возьмем образец с квадратным поперечным сечением [19] ($D=0.293$ см, $L=2.9$ см) и градиентом температуры вдоль направления [100]. При самых низких температурах при учете граничного рассеяния ($v^\lambda = v^\lambda_B$) теплопроводность следует зависимости $\kappa(T) \sim T^3$ (см. рис. 3.3, кривая 2).

В низкотемпературной области ($T=3$ К) рассчитанные значения теплопроводности оказались на 4-8% выше экспериментальных значений. Для объяснения этого расхождения в работах [22,23] была использована концепция дефектного поверхностного слоя, предложенная в работах [32,87,88]. Однако в работах [20,63] не учитывалось изотопическое рассеяние, вклад которого при $T=3$ К составляет 5%. Как видно

из рисунка 3.3 (кривая 2), учет изотопического и граничного рассеяния ($\nu^\lambda = \nu_B^\lambda + \nu_{iso}^\lambda$) позволил согласовать результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными в интервале температур от 3 до 15 К в пределах погрешности эксперимента без использования подгоночных параметров. При температурах

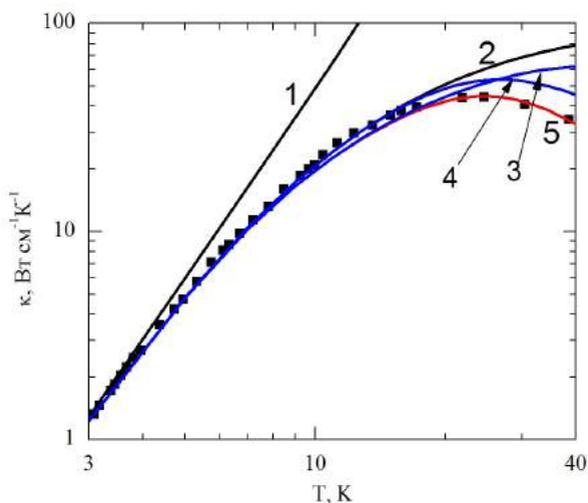


Рис. 3.3. Температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si с квадратным сечением ($L=2.9$ см, $D=0.293$ см) для направления [100] при учете следующих механизмов релаксации фононов: (кривая 1) – учет граничного рассеяния, кривая 2 – учет граничного рассеяния и рассеяния на изотопическом беспорядке, кривая 3 – учет граничного рассеяния, рассеяния на изотопическом беспорядке и нормальных процессов фонон-фононного рассеяния, кривая 4 – учет граничного рассеяния, рассеяния на изотопическом беспорядке и процессов переброса, кривая 5 – учет учета всех механизмов релаксации фононов, символы – экспериментальные значения [19].

больших 15 К уже становятся существенными N-процессы фонон-фононного рассеяния и процессы переброса (см. рис 3.3, кривые 3 и 4). Полный учет всех процессов рассеяния с подгоночными параметрами, приведенными в таблице 3.1, позволяет согласовать результаты расчета с экспериментом [19] во всем измеренном интервале температур вплоть до 40 К (см. рис. 3.3, кривая 1). Следует отметить, что главную роль в загибе температурной зависимости теплопроводности играют процессы переброса (сравните кривые 3 и 5 на рисунке 3.3). На рисунке 3.4

представлены температурные зависимости теплопроводности трех одинаковых образцов кремния с квадратным поперечным сечением для симметричных направлений теплового потока, рассчитанные с использованием вычисленных нами времен релаксации фононов для диффузного рассеяния на границах.

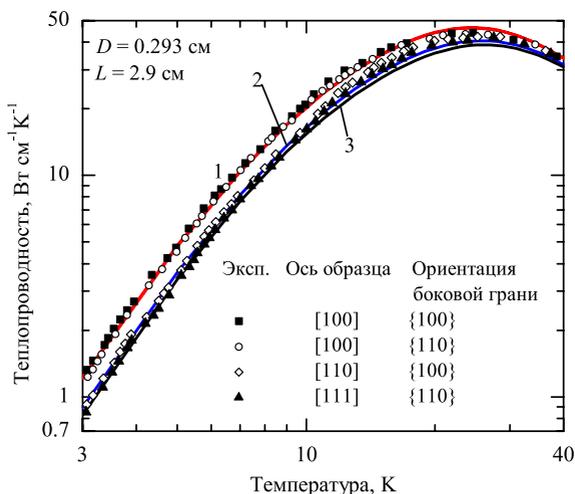


Рис. 3.4. Температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния с квадратным сечением ($L=2.9 \text{ см}$, $D=0.293 \text{ см}$) для симметричных направлений градиента температуры: кривая 1 для направления [100], кривая 2 – для направления [110] и кривая 3 – для направления [111]. Символы – экспериментальные значения [19]

Как видно из рисунка 3.4, развитая нами теория корректно описывает анизотропию и температурные зависимости теплопроводности для образцов кремния с квадратным сечением, т. е. первый из обнаруженных в работе [19] эффектов. Причем, для всех образцов, имеющих различные направления теплового потока относительно кристаллографических осей, результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом в интервале температур от 3 до 15 К без использования подгоночных параметров (см. рис. 3.4). Максимальная теплопроводность наблюдается для образцов с направлением потока тепла вдоль [100], и при низких температурах она превышает теплопроводность образцов с осью вдоль [110] и [111] соответственно на 36 и 50%. Эти оценки согла-

суются с экспериментальной анизотропией теплопроводности [19]. Использование формул (3.10), (3.11), а также (3.13) – (3.16) для рассеяния фононов на границах позволяет удовлетворительно описать второй эффект МакКарди [19] – зависимость величин теплопроводности от ориентации широких граней образца. Из рисунка 3.5 видно, что температурные зависимости теплопроводности, рассчитанные для двух образцов с прямоугольным сечением, имеющих одинаковые площадь поперечного сечения и направление градиента температуры, но различные ориентации широких граней образцов, хорошо согласуются с данными эксперимента [19] (см. рис. 3.5). При $T=3$ К для образца с широкой гранью {100} и узкой {110} теплопроводность оказалась на 31% выше, чем для образца с широкой гранью {110} и узкой {100}. В пределах

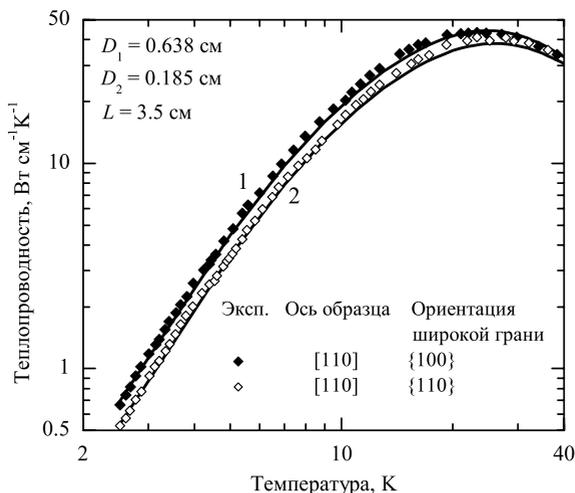


Рис. 3.5. Температурные зависимости теплопроводности для образцов с прямоугольным сечением ($L=3.5$ см, $D_1=0.185$ см, $D_2=\mu D_1=0.638$ см, $\mu=3.45$) и ориентацией градиента температуры в направлении [110]. Кривая 1 относится к образцам с широкой гранью {100}, кривая 2 относится к образцам с широкой гранью {110}. Символы – экспериментальные значения [19]

погрешности эксперимента этот результат согласуется с экспериментальным значением 33%. Отметим, что для образцов с прямоугольным сечением, как и для образцов с квадратным сечением в интервале температур $3 \text{ К} < T < 15 \text{ К}$ отклонение рассчитанных значений $\kappa(T)$ от экс-

периментальных данных [19] не превышает погрешности эксперимента. Таким образом, в интервале температур, где доминирует рассеяние на границах и изотопическом беспорядке наша теория количественно описывает оба эффекта в теплопроводности кристаллов кремния, обнаруженных в работе МакКарди [19] без использования подгоночных параметров. Эти результаты свидетельствуют, что аналитические решения 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 других полупроводниковых и диэлектрических материалах.

Экспериментальные данные [19] показывают, что при переходе от режима граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации (выше максимума) анизотропия теплопроводности с повышением температуры быстро убывает (см. рис. 3.4 и 3.5). Различие экспериментальных значений $\kappa(T)$ для симметричных направлений в окрестности максимума не превышает 6%, а при $T=40$ К их значения в пределах погрешности эксперимента совпадают, т.е. эффект фокусировки фононов уже не сказывается на величинах теплопроводности. Максимальное различие рассчитанных и экспериментальных значений [19] имеет место в окрестности максимума теплопроводности. Так, например, при $T_{\max}=25$ К значения теплопроводности оказываются выше на 5%, а в направлениях [101] и [111] ниже экспериментальных величин на 4% и 6%, соответственно. Хотя отклонение от экспериментальных данных в окрестности максимума не велико, однако результаты расчета дают максимальное значение анизотропии 19%, что заметно больше, чем следует из эксперимента. При более высоких температурах анизотропия теплопроводности быстро уменьшается: согласно нашим расчетам при $T=60$ К она оказывается равной погрешности эксперимента (4%). Как уже отмечалось, возможной причиной расхождения с экспериментальными данными в области максимума является использование правила Маттиссена при переходе от граничного рассеяния к объемному. Это приближение дает слишком медленное уменьшение анизотропии теплопроводности, связанное с фокусировкой и, видимо, не является достаточно точной процедурой в данном случае.

Херринг [38,105], анализируя роль низкоэнергетических фононов в теплопроводности и термоэдс монокристаллических полупроводни-

ков, также указал на слабость правила Маттиссена при температурах вблизи максимума $\kappa(T)$. Связано это с тем, что граничное рассеяние фононов происходит вблизи поверхности образца, а объёмные процессы рассеяния происходят равномерно по всему объёму. Поэтому они не могут аддитивно складываться, как это следует из правила Маттиссена. Очевидно, что максимальное отклонение от правила Маттиссена будет иметь место в условиях, когда скорости релаксации фононов в объёмных механизмах и граничном рассеянии сравниваются. Для того, чтобы корректно учесть совместное действие граничного и объёмных механизмов рассеяния фононов, необходимо решить кинетическое уравнение Больцмана при неоднородном распределении теплового потока по поперечному сечению образца. При учете фокусировки фононов эта задача является достаточно сложной и требует отдельного рассмотрения.

Сравним роль граничного и объёмных механизмов рассеяния фононов в теплопроводности кристаллов кремния (см. рис. 3.6). Для этого рассчитаем температурные зависимости теплопроводности $\kappa(T)$ в режиме граничного рассеяния фононов ($v_{(2)}^\lambda(q) = v_B^\lambda(q)$) (кривая 2) и при учете только объёмных механизмов релаксации фононов $v_{(5)}^\lambda(q) = v_{iso}^\lambda(q) + v_U^\lambda(q) + v_N^\lambda(q)$ (кривая 5) (см. рис. 3.6). При температурах ниже максимума теплопроводности доминирующий вклад в теплосоппротивление вносят рассеяние на границах и изотопическом беспорядке. Причем, при $T=3$ К рассеяние на границах обеспечивает 95% теплосоппротивления, а изотопическое рассеяние – 5%. С увеличением температуры относительный вклад рассеяния на границах уменьшается, а вклад объёмных механизмов релаксации возрастает. При температуре $T_{BV} = 18.5$ К для кристаллов Si^{nat} с натуральным составом изотопов происходит пересечение кривых 2 и 5. Это означает, что вклады в теплосоппротивление от объёмных механизмов релаксации и граничного рассеяния сравниваются, и при $T = T_{BV}$ происходит переход от режима граничного рассеяния к доминирующей роли объёмных механизмов релаксации (см. рис. 3.6).

Если мы предположим, что при переходе к изотопически чистым кристаллам кремния Si^{28} скорости релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния (процессах переброса и нормальных процессах рассеяния) не изменятся, то можно оценить изотопический эффект в теплопроводности Si^{28} и определить для них температуру перехода T_{BV} . В этом случае пересечение кривой 2 и кривой 4, учитывающей

только ангармонические процессы рассеяния ($\nu_{(4)}^{\lambda}(q) = \nu_U^{\lambda}(q) + \nu_N^{\lambda}(q)$), происходит при более высокой температуре $T_{BV} = 22.4$ К. При этом температура максимума теплопроводности уменьшается от 25 К для Si^{nat} до 20 К для изотопически чистого кремния Si^{28} . Максимальные значения теплопроводности при переходе от кристаллов Si^{nat} к изотопически чистым кристаллам Si^{28} увеличиваются в 3.5 раза. Это означает, что при $T = T_{\text{max}}$ вклад изотопического рассеяния в теплосоппротивление оказывается в 3.5 раза больше, чем суммарный вклад остальных механизмов релаксации фононов. Мы дали достаточно грубую оценку изотопического эффекта в теплопроводности кристаллов кремния, которая не учитывает возможное нарушение правила Маттисена для граничного и объёмных механизмов релаксации, а также интерференцию изотопического и ангармонических процессов рассеяния.

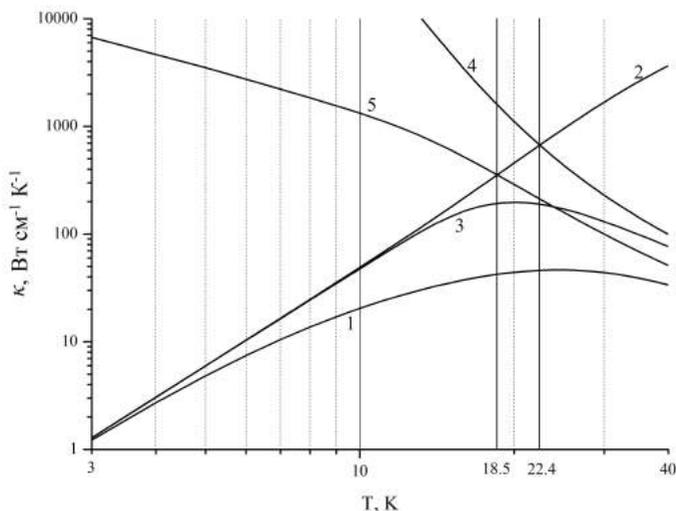


Рис. 3.6. Температурные зависимости полной теплопроводности для направления $[100]$ (кривая 1) и зависимости ее для различных механизмов релаксации фононов: кривая 2 – теплопроводность в режиме граничного рассеяния, кривая 3 – для моноизотопного образца Si^{28} , кривая 4 – для ангармонических процессов рассеяния, кривая 5 – для объёмных механизмов рассеяния

Рассмотрим влияние дисперсии тепловых фононов на зависимость теплопроводности $\kappa(T)$ кристаллов Si от температуры. Из рисунка 3.7 видно, что для направления $[100]$ при температурах ниже 20 К роль

дисперсии мала: отличие кривых, рассчитанных с учетом дисперсии (сплошные кривые) и в модели анизотропного континуума (штриховые кривые) не превышает погрешности эксперимента. При более высоких температурах различие возрастает: при температурах 25 и 40 К оно составляет 5% и 14%, соответственно. Максимальное влияние дисперсия оказывает на вклад медленной поперечной моды в теплопроводность: учет её приводит к уменьшению теплопроводности на 15% по сравнению с моделью анизотропного континуума. Значительно меньшее влияние оказывает дисперсия на продольные фононы и быструю поперечную моду (см. рис. 3.7). Анализ дрейфового движения продольных фононов показал, что в интервале температур $3 \text{ К} < T < 40 \text{ К}$ его вклад в

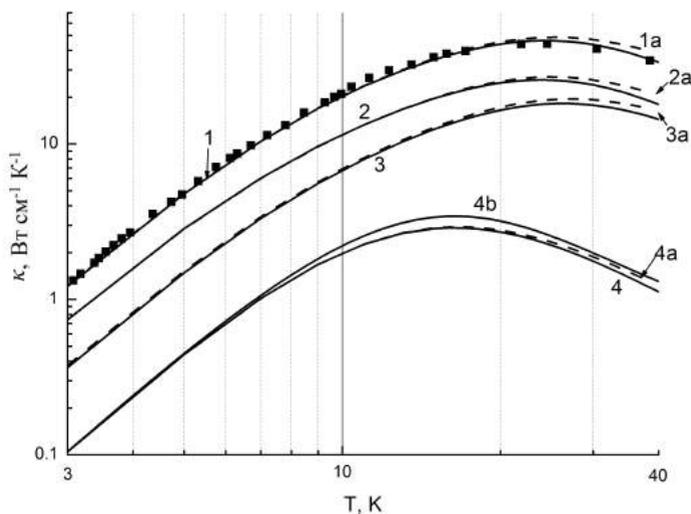


Рис. 3.7. Зависимости $\kappa(T)$ (кривые 1, 1a), а также вкладов медленных (кривые 2, 2a), быстрых (кривые 3, 3a) поперечных и продольных (кривые 4, 4a, 4b) фононов для образцов с квадратным сечением в направлении [001]. Кривые 1,2,3,4 рассчитаны с учетом дисперсии, кривые 1a,2a,3a,4a рассчитаны в модели анизотропного континуума. Кривая 4b – вклад продольных фононов с учетом их дрейфового движения. Символы – экспериментальные значения [19]

полную теплопроводность мал и им можно пренебречь. Максимальное значение этого вклада достигается в области максимума $\kappa_{[001]}^L(T)$ при $T_{\max}^L = 17 \text{ К}$ и составляет 18% (см. рис. 3.7). Поскольку вклад продоль-

ных фононов в полную теплопроводность составляет всего 7.6%, то вклад дрейфового движения продольных фононов в полную теплопроводность не превышает 1.5%. Итак, дрейфовым движением продольных фононов для кристаллов кремния с натуральным изотопическим составом в рассматриваемом температурном интервале 3 – 40 К можно пренебречь.

3.4. ИЗМЕНЕНИЕ АНИЗОТРОПИИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ С ТЕМПЕРАТУРОЙ

Расчитаем угловые зависимости теплопроводности образцов Si с квадратным сечением, исследованных в [19], при вращении потока тепла в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ в соответствии с формулами (3.10) – (3.19) и проанализируем изменение анизотропии теплопроводности с температурой. На рисунках 3.7 сплошными кривыми представлен расчет угловых зависимостей теплопроводности и вкладов в него от всех ветвей фононного спектра с учетом всех актуальных механизмов релаксации фононов (3.10)-(3.19) при температурах 3 и 25 К. Штриховыми линиями на рисунках 3.8а,б приведены угловые зависимости теплопроводности при $T = 3$ К в режиме граничного рассеяния фононов, когда единственным механизмом релаксации фононов является диффузное рассеяние на границах. В этом случае результаты расчета оказываются на 4-8% выше экспериментальных значений. При учете изотопического рассеяния, вклад которого при $T=3$ К составляет 5% результаты расчета теплопроводности хорошо согласуются с экспериментальными данными [19] (см. рис. 3.8а,б). Как отмечалось в разделе 3.3, учет изотопического и граничного рассеяния с использованием вычисленных нами времен релаксации фононов позволил согласовать результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности для всех симметричных направлений теплового потока с экспериментальными данными в интервале температур от 3 до 15 К в пределах погрешности эксперимента без использования подгоночных параметров. Расчет угловых зависимостей теплопроводности образцов Si с квадратным сечением подтвердил этот вывод (см. рис. 3.8а,б).

Как видно из рисунков 3.8, анизотропия теплопроводности обусловлена, главным образом, вкладом медленных поперечных фононов,

которые фокусируются в направлениях типа $[001]$ и обеспечивают максимум теплопроводности именно в этих направлениях. Максимальное значение анизотропия теплопроводности достигает при $T=3$ К: отно-

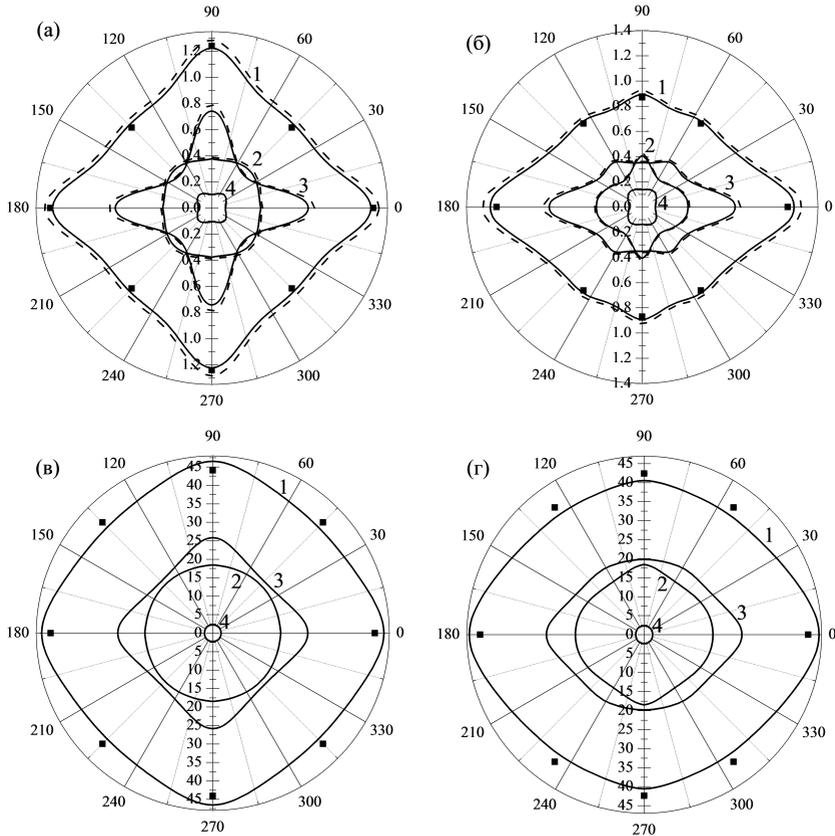


Рис. 3.8. Угловые зависимости полной теплопроводности $\kappa(\psi)$ ($\text{Вт см}^{-1} \text{К}^{-1}$) (кривые 1) и вкладов в нее от каждой из ветвей фононного спектра при температурах (а,б) – 3 К, (в,г) – 25 К для образцов с квадратным сечением ($L=2.9$ см, $D=0.293$ см): кривые 2 – для быстрой поперечной 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. Штриховые линии на рисунках (а,б) – расчет теплопроводности в режиме граничного рассеяния фононов.

Символы – экспериментальные значения [19]

шение теплопроводностей в симметричных направлениях имеет вид $\kappa_{[001]} : \kappa_{[110]} : \kappa_{[111]} \approx 1.5 : 1.1 : 1$. Для плоскости $\{110\}$ в направлениях $[111]$ и $[110]$ угловые зависимости теплопроводности имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой быстрой поперечной и продольной модами, соответственно (см. рис. 3.8б). При увеличении температуры анизотропия теплопроводности уменьшается. В интервале от 3–15 К наши расчеты согласуются с данными [19] в пределах погрешности эксперимента, как по величинам теплопроводности, так и по анизотропии. Однако по мере приближения к максимуму теплопроводности расхождение результатов расчета и данных эксперимента возрастают (см. рис. 3.8). В направлениях $[001]$ при $T=25$ К они становятся на 6% выше, а в направлениях $[110]$ и $[111]$ на 5–6% ниже данных [19]. Хотя отклонение теоретических зависимостей от экспериментальных данных в окрестности максимума не велико (5–6%), однако результаты расчета дают для отношения $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} \approx 1.19$ вместо 1.06 для экспериментальных данных. Как уже отмечалось, возможной причиной этого расхождения является использование правила Маттиссена для времен релаксации фононов в окрестности перехода от граничного рассеяния к объемному.

Для образцов с квадратным сечением при фиксированном направлении градиента температуры зависимость теплопроводности от ориентации боковых граней образца является слабой. Для направления теплового потока $[001]$ и ориентации боковых граней $\{100\}$ величины теплопроводности будут больше, чем при ориентации $\{110\}$ всего на 1.3 %. Для образцов с прямоугольными сечениями и направлении градиента температуры $[110]$ зависимость теплопроводности от ориентации боковых граней образца становится более существенной (см. рис. 3.9). Для направления градиента температуры $[110]$ при $T=3$ К теплопроводность образца с широкой гранью $\{100\}$ оказалась на 30% больше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$. Как видно из рисунка 3.9, этот результат согласуется с экспериментом [19]. Анализ показал, что для потока тепла в направлении $[100]$ анизотропия теплопроводности образцов с прямоугольным сечением тех же геометрических размеров, что и в [19], значительно меньше: для образца с широкой гранью $\{100\}$ теплопроводность всего лишь на 5% выше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$.

Следует отметить, что в рассматриваемой области температур $3 \text{ K} < T < 40 \text{ K}$ доминирующий вклад в теплопроводность вносят поперечные фононы (см. таблицу 3.2). Медленные поперечные фононы фокусируются в направлении $[100]$, и их вклад в этом направлении максимален – при температуре $T=3 \text{ K}$ он достигает 61% полной теплопроводности, а вклад быстрой поперечной моды в два раза меньше - 31% (см. рис. 3.7). При увеличении температуры до 40 K для направления $[001]$ вклад медленной поперечной моды уменьшается до 54%, а быстрой поперечной моды возрастает до 43% (см. рис. 3.7). Для продольных фононов направление $[001]$ соответствует направлению дефокусировки,

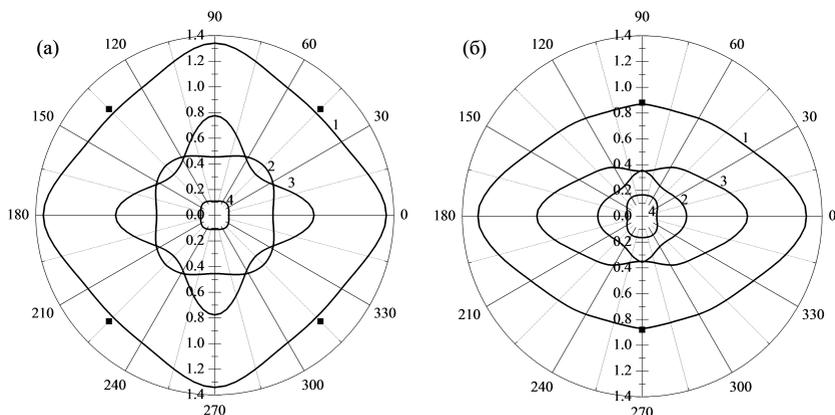


Рис. 3.9. Угловые зависимости полной теплопроводности $\kappa(\psi)$ ($\text{Вт см}^{-1} \text{K}^{-1}$) (кривые 1) и вкладов в нее от каждой из ветвей фононного спектра при температуре 3 K для образцов с прямоугольным сечением ($L=3.5 \text{ см}$, $D=0.185 \text{ см}$ и $\mu=3.45$). (а) – ось образца (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 [19]

поэтому их вклад минимален – при $T=3 \text{ K}$ он составляет 8%. Продольные фононы фокусируются в направлениях $[111]$, и их вклад в этом направлении максимален – при $T=3 \text{ K}$ он достигает 19% полной теплопроводности (см. таблицу 3.2). С увеличением температуры в интервале от 3 до 40 K суммарный вклад поперечных фононов возрастает от 92% при $T=3 \text{ K}$ до 97% при $T=40 \text{ K}$. 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% при $T=3$ до 4% при $T=40$ К (см. таблицу 3.2). Такое поведение вкладов продольных и поперечных фононов в теплопроводность кремния обусловлено различным влиянием ангармонических механизмов

Таблица 3.2

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

| $\tilde{\kappa}_{[L]}^{\lambda}(T)$ | [001] | | | [101] | | | [111] | | |
|-------------------------------------|-------|------|-------|-------|------|-------|-------|------|-------|
| | 3 К | 25 К | 40 К | 3 К | 25 К | 40 К | 3 К | 25 К | 40 К |
| $\tilde{\kappa}_{[L]}^{l1}$ | 0.31 | 0.40 | 0.432 | 0.46 | 0.45 | 0.458 | 0.30 | 0.42 | 0.444 |
| $\tilde{\kappa}_{[L]}^{l2}$ | 0.61 | 0.55 | 0.535 | 0.39 | 0.49 | 0.506 | 0.51 | 0.52 | 0.519 |
| $\tilde{\kappa}_{[L]}^L$ | 0.08 | 0.05 | 0.033 | 0.15 | 0.06 | 0.036 | 0.19 | 0.06 | 0.037 |

рассеяния. Для продольных фононов в окрестности максимума теплопроводности основную роль играют нормальные процессы рассеяния, тогда как для поперечных – процессы переброса. Поэтому температура максимума для поперечных фононов оказывается на 8 К выше, чем для продольных фононов. Заметим, что переход от граничного к объемным механизмам релаксации для продольных фононов происходит при $T_B \approx 14$ К, тогда как для поперечных фононов при $T_B \approx 18$ К.

3.5. ФИЗИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ЭФФЕКТОВ МАККАРДИ В ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

Проанализируем влияние фокусировки на распространение фононов в монокристаллических образцах с квадратным сечением и дадим наглядное физическое объяснение анизотропии теплопроводности, т.е. первого эффекта МакКарди. Влияние фокусировки фононов на теплопроводность упруго анизотропных кристаллов связано с отличием направлений волнового вектора и групповой скорости, которая определя-

ет направление распространения (см. рис. 3.10). Проиллюстрируем фокусировку фононов на примере моды t_2 в кристаллах Si для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ (см. рис 3.10а). Построим для неё изоэнергетическую поверхность и определим направления групповых скоростей фононов. Характерные углы $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ и θ_4 определены в разделе 1.5.

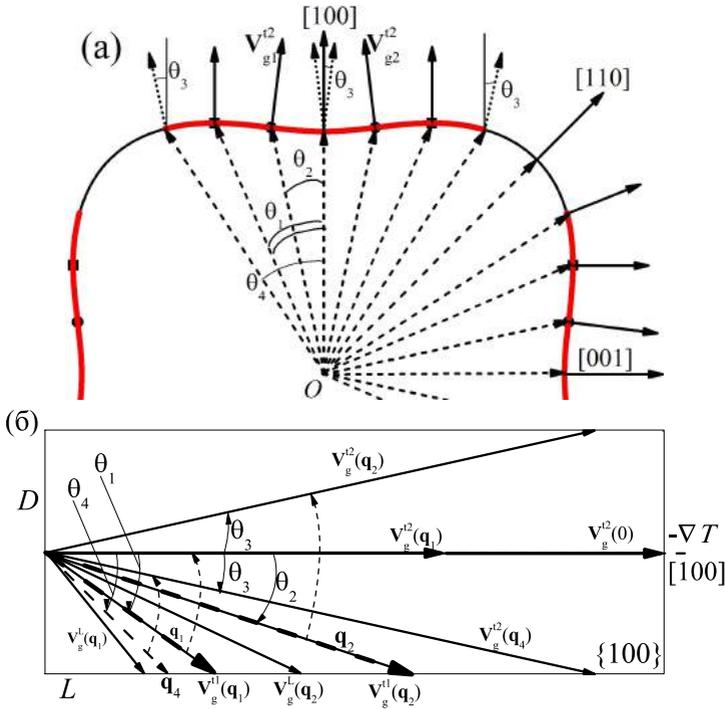


Рис. 3.10. (а) Схема, иллюстрирующая фокусировку медленных поперечных мод в кристаллах Si для сечения изоэнергетической поверхности плоскостью $\{100\}$. Стрелками изображены волновые вектора внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её. (б) Схема, иллюстрирующая влияние фокусировки на распространение фононов в образцах Si длиной L с квадратным сечением $D \times D$ для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ с углами $\theta_1^{t_2} = 23.6^\circ$, $\theta_2^{t_2} = 11.9^\circ$, $\theta_3^{t_2} = 6.8^\circ$, $\theta_4^{t_2} = 28.6^\circ$ и градиентом температуры вдоль $[100]$

В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают, и фононы с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ будут распространяться в том же самом секторе. Однако,

как видно из рисунка 3.10, в кремнии направления волновых векторов и групповых скоростей отличаются, и фононы медленной поперечной моды будут распространяться в существенно меньшем секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$, который определяется направлениями групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности (см. подробнее [69,71]). Так, например, в кристаллах Si с квадратным сечением для теплового потока в направлении [100] фононы с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ (для Si $\theta_4 = 28.6^\circ$) будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться в секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$, где для Si $\theta_3 = 6.8^\circ$ (см. рис. 3.10). В результате в секторе фокусировки $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$ средняя плотность состояний моды t_2 для Si будет в отношении $\theta_4 / \theta_3 \approx 4.2$ больше, чем в изотропной среде. Напротив, для сектора дефокусировки $\pi/2 - \theta_3 \geq \theta \geq \theta_3$ она будет в 2.3 раза меньше, чем в изотропной среде. При этом средняя плотность состояний моды t_2 в кристаллах Si в секторе фокусировки будет в 9.9 раза больше, чем в секторе дефокусировки (см. раздел 1.5).

Далее рассмотрим более подробно влияние фокусировки на распространение фононных мод в образцах Si с квадратным сечением. Можно надеяться, что оно будет полезно в технических приложениях при конструировании кремниевых электронных приборов. Отметим некоторые особенности, обусловленные влиянием фокусировки на распространение фононов моды t_2 в плоскости $\{100\}$. Во-первых, фононы с волновыми векторами \mathbf{q}_1 (для Si $\theta_1 = 23.6^\circ$) будут распространяться в направлении теплового потока [100] (см. рис. 3.10). Их длина пробега при диффузном отражении от границ может быть ограничена либо объёмными механизмами релаксации, либо длиной образца. Во-вторых, поскольку в кристаллах Si фононы моды t_2 с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться под меньшими углами – в секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$, то длины свободного пробега для них могут значительно возрасти (см. рис. 3.10). *Заметим, что при диффузном рассеянии длина свободного пробега фонона с волновым вектором q определяется расстоянием, пройденным фононом до столкновения с поверхностью образца.* Так, например, для Si фононы с волновым вектором $\pm \mathbf{q}_4$ и углом $\theta_4^{i2} = 28.6^\circ$ будут распространяться под существенно меньшим углом $\theta_3 = 6.8^\circ$, в результате их длина пробега возрастет (см. рис. 3.10). Для продольной моды направление [001] является направлением дефокусировки.

Поэтому продольные фононы будут отклоняться от оси образца в сторону боковой грани, и их длина свободного пробега будет меньше, чем в модели изотропной среды (см. рис. 3.10). Для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ быстрая поперечная мода изотропна, эффект фокусировки для нее отсутствует. Её длина свободного пробега будет совпадать с полученной в модели изотропной среды (см. рис. 3.10). Итак, из схем, приведенных на рисунке 3.10, следует, что максимум теплопроводности для кристаллов первого типа в направлениях типа $[100]$ обусловлен вкладом медленных поперечных фононов.

Рассмотрим распространение фононных мод в осевом сечении образца $\{100\}$ в случае, когда градиент температуры направлен вдоль $[110]$. Направление $[110]$ соответствует дефокусировке медленной поперечной моды t_2 . Поэтому фононы этой моды будут отклоняться в сторону грани образца, и их длина свободного пробега будет меньше,

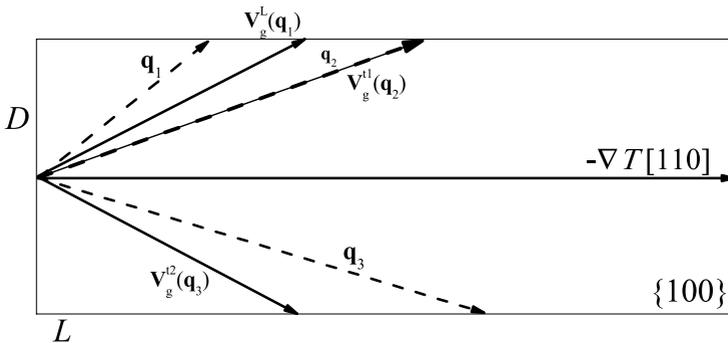


Рис. 3.11. Схема, иллюстрирующая эффект фокусировки фононов в образцах Si с прямоугольным сечением для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ и градиента температуры вдоль $[110]$

чем в модели изотропной среды (см. рис. 3.11). Для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ быстрая поперечная мода изотропна, эффект фокусировки для нее отсутствует. Её длина свободного пробега будет совпадать с полученной в модели изотропной среды (см. рис. 3.11). Продольные фононы в этой плоскости имеют локальную фокусировку в направлении $[110]$. Они будут отклоняться к оси образца, и их длина пробега будет больше, чем в модели изотропной среды. Следует отметить,

что роль продольных фононов в фононном транспорте для кремния мала, поскольку их теплоемкость на порядок меньше суммарной теплоемкости поперечных фононов, а вклад в теплопроводность для направлений $[001]$ и $[110]$ составляет всего 8% и 15%, соответственно.

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

Непосредственный расчет длин свободного пробега подтверждает приведенные выше качественные рассуждения (см. рис. 2.6). В работе [20] было показано, что длины свободного пробега для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях фокусировки, причем в этих направлениях они превосходит длины пробега остальных колебательных мод. Их минимальные значения достигаются в направлениях дефокусировки, причем, они оказываются меньше рассчитанных в модели изотропной среды. Так, например, в кристаллах Si длина свободного пробега медленной поперечной моды t_2 в направлениях фокусировки превосходит длины пробега быстрой поперечной и продольной мод в 1.6 раза и 2.4 раза, соответственно. Поскольку средняя плотность состояний моды t_2 благодаря эффекту фоку-

сировки также возрастает, то в результате действия этих двух эффектов вклад медленных поперечных фононов в теплопроводность для направления $[100]$ при температуре $T=3$ К достигает 61% полной теплопроводности и в два раза превышает вклад быстрой поперечной моды. Итак, первый эффект МакКарди в образцах Si обусловлен медленной поперечной модой, которая фокусируется в направлении $[001]$ и обеспечивает максимум теплопроводности в этом направлении.

Проанализируем влияние фокусировки на распространение фононов в монокристаллических образцах с прямоугольным сечением и дадим физическое объяснение второго эффекта МакКарди. Рассмотрим сначала образцы с широкой гранью $\{001\}$ и узкой $\{110\}$. Основной вклад в граничное рассеяние фононов вносит рассеяние на широких гранях образца (плоскостях пленок). Поэтому проанализируем фокусировку и дефокусировку фононов различных поляризаций в плоскости $\{110\}$, перпендикулярной широкой грани образца и их отклонение от направления градиента температуры $[110]$ (см. рис. 3.12).

В направлении $[110]$ фокусируются фононы быстрой поперечной моды, поэтому они будут отклоняться от широкой грани образца к направлению градиента температур (см. рис. 3.12). Их длина свободного пробега будет больше, чем в модели изотропной среды. Из рисунка 3.12 видно, что в образцах Si с прямоугольным сечением для теплового потока в направлении $[110]$ фононы моды t_1 с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ (для моды t_1 в плоскости $\{110\}$ $\theta_4 = 15.7^\circ$) будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться в секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$, для Si $\theta_3^{II} = 0.86^\circ$. В результате для направлений $[110]$ плотность состояний для моды t_1 будет существенно больше, а для направлений дефокусировки значительно меньше, чем для изотропной среды (см. раздел 1.5). При этом фононы моды t_1 в плоскости $\{110\}$ с волновым вектором \mathbf{q}_1 и углом θ_1 (для Si $\theta_1^{II} = 13.4^\circ$) будут распространяться в направлении теплового потока $[110]$ (см. рис. 3.12), а фононы с волновым вектором \mathbf{q}_2 и углом θ_2 (для моды t_1 $\theta_2^{II} = 7.5^\circ$) будут распространяться под углом $-\theta_3$ ($\theta_3^{II} = 0.86^\circ$) (см. рис. 3.12).

Направление $[110]$ является направлением дефокусировки медленной поперечной моды, и ее длина свободного пробега меньше, чем в изотропной среде (см. рис. 3.12). Продольные фононы фокусируются в направлении $[111]$, а направление $[110]$ соответствует направлению дефокусировки для волновых векторов в плоскости $\{110\}$. Поэтому они

будут отклоняться от направления градиента температур к широкой грани образца, их длина свободного пробега будет меньше, чем в модели изотропной среды. Как уже отмечалось, роль продольных фононов в фононном транспорте мала в связи с малой теплоемкостью.

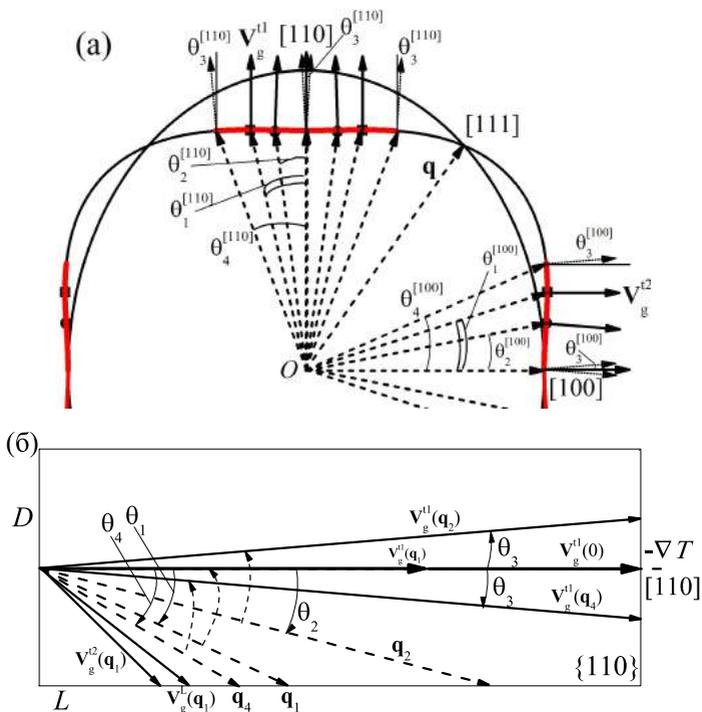


Рис. 3.12. Схемы, иллюстрирующие влияние фокусировки на распространение фононов в образцах Si с прямоугольным сечением в плоскости $\{110\}$ и градиента температуры вдоль $[110]$. Рассмотрены фононы с волновыми векторами, направленными под углами $\theta_1^i = 13.4^\circ$, $\theta_2^i = 7.5^\circ$, $\theta_3^i = 0.86^\circ$ и $\theta_4^i = 15.7^\circ$

Другая ситуация складывается для образцов с широкой гранью $\{110\}$ и узкой $\{001\}$. Аналогично предыдущему случаю мы должны рассматривать фокусировку фононов в плоскости перпендикулярной широкой грани, т.е. в $\{001\}$. В плоскости $\{001\}$ быстрая поперечная мода изотропна, эффект фокусировки для нее отсутствует, и длина свободного пробега для неё будет совпадать с полученной в модели изотропной среды. В этой плоскости, как и в плоскости $\{110\}$ для на-

правления $[110]$ медленная поперечная мода t_2 дефокусируется. Поэтому фононы этой моды будут отклоняться от направления градиента температуры в сторону широкой грани, и их длина свободного пробега, как и в предыдущем случае, будет меньше, чем в модели изотропной среды (см. рис. 3.12). Продольные фононы в этой плоскости имеют локальную фокусировку в направлении $[110]$, и они будут отклоняться от широкой грани образца к направлению градиента температур. Однако, как уже отмечалось выше, их роль в теплопроводности мала. Очевидно, что в рассматриваемом случае средняя длина свободного пробега и теплопроводность для образцов с широкой гранью $\{001\}$ будет больше, чем для образцов с широкой гранью $\{110\}$. Непосредственный расчет дает величину эффекта 31%. Авторы [19] очень удачно выбрали направление $[110]$ для направления теплового потока, поскольку в этом направлении медленная поперечная мода дефокусируется, как в плоскости $\{001\}$, так и в плоскости $\{110\}$. Напротив, в направлении $[110]$ быстрая поперечная моды в плоскости $\{110\}$ фокусируется, а в плоскости $\{001\}$ для неё эффект фокусировки отсутствует. Если мы возьмем образцы кремния с прямоугольным сечением и тех же геометрических параметров, как в [19], но вырежем их в направлении $[100]$, то получим, для образца с широкой гранью $\{100\}$ теплопроводность всего лишь на 5% выше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$. Итак, из приведенного выше анализа следует, что второй эффект МакКарди [19] обусловлен фокусировкой быстрой поперечной моды в направлении $[110]$ для волновых векторов в диагональной плоскости.

3.6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты третьей главы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Предложен метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов.
2. Показано, что использование вычисленных нами времен релаксации фононов для диффузного рассеяния на границах образцов конечной длины с квадратным и прямоугольным сечениями позволяет адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности кристаллов кремния для различных направлений градиента температуры и

ориентаций боковых граней образцов во всем исследованном интервале температур. До настоящего времени при анализе температурных зависимостей теплопроводности для скоростей релаксации фононов на границах всегда вводились подгоночные параметры для учета влияния геометрических параметров и ориентаций боковых граней образцов, а также направлений теплового потока на теплопроводность монокристаллических образцов. Аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины позволило избавиться от них для граничного рассеяния фононов. Показано, что в интервале температур от 3 до 15 К, когда доминирует рассеяние на границах и изотопическом беспорядке, наша теория количественно в пределах погрешности эксперимента описывает температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния для всех направлений теплового потока в образцах с квадратным сечением и зависимость от ориентации боковых граней для образцов с прямоугольным сечением без использования подгоночных параметров.

3. Показано, что анизотропия теплопроводности образцов кремния с квадратным и сечением обусловлена, главным образом, вкладом медленных поперечных фононов, которые фокусируются в направлениях типа $[001]$ и обеспечивают максимум теплопроводности именно в этом направлении.

4. Дана физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности кубических кристаллов. Анализ влияния фокусировки на распространение фононов в монокристаллах кремния показал, что первый эффект МакКарди в образцах с квадратным сечением обусловлен фокусировкой медленной поперечной моды, а второй эффект МакКарди в образцах с прямоугольным сечением обусловлен фокусировкой быстрой поперечной моды.

Глава 4. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ АНИЗОТРОПИИ УПРУГОЙ ЭНЕРГИИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Как мы уже убедились в предыдущем разделе для объемных образцов кремния анизотропия упругих свойств приводит к зависимости теплопроводности и длин свободного пробега фононов от направления потока тепла и ориентации боковых граней образцов [20, 21]. Поэтому представляет интерес исследовать влияние фокусировки на фононный транспорт в пленках и нанопроводах с различным типом анизотропии упругой энергии. В данном разделе мы рассмотрим случай низких температур, когда теплосоппротивление наноструктур обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. Анализ, проведенный в работах [4-7,23,24] показал, что для нанопроводов с диаметрами большими 50 нм и пленок с толщинами большими 20 нм в интервале температур от 20 до 50 К теплопроводность следовала зависимости $\kappa(T) \sim T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при указанных ограничениях влиянием пространственного конфаймента на спектр акустических мод можно пренебречь и использовать модель анизотропного континуума для анализа фононного транспорта в таких наноструктурах.

В этой главе проанализируем фононный транспорт в монокристаллических пленках и нанопроводах на основе кубических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии. Рассмотрим наноструктуры на основе кубических кристаллов с положительной $k-1 > 0$ (GaN, GaAs, LiF Ge, MgO, Si, алмаз, YAG) и отрицательной $k-1 < 0$ (NaCl, CaF₂, SrF₂, YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка (см. таблицу 1.2). Исследуем изменение величин теплопроводности при уменьшении параметра $|k - 1|$ для наноструктур из кристаллов первого типа: от GaN ($k - 1 = 1.275$) к YAG ($k - 1 = 0.03$), а также для наноструктур из кристаллов второго типа: от NaCl ($k - 1 = -0.48$) к YIG ($k - 1 = -0.04$) (см. таблицу 1.2). Проведем сравнение с моделью изотропной среды, для которой $k - 1 = 0$. Покажем, что с уменьшением параметра $|k - 1|$ длины пробега фононов стремятся к значениям, полученным в модели изотропной среды [27].

Исследование зависимостей теплопроводности и длин пробега фононов от геометрических параметров наноструктур, направлений теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно осей кристалла являются важными проблемами для технического использования наноструктур в микроэлектронике. Анализ влияния анизотропии упругой энергии на распространение фононов в пленках и нанопроводах позволяет определить оптимальные ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальную и минимальную теплопроводность наноструктур.

Основной задачей этого раздела является исследование анизотропии теплопроводности в режиме кнудсеновского течения фононного газа и её зависимостей от геометрических параметров и направлений теплового потока в упруго анизотропных наноструктурах. Отметим, что при исследовании теплопроводности в наноструктурах (см. обзоры [1-3]) не рассматривались такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров пленок, от направлений теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно осей кристалла. Решение этих проблем позволяет определить ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов полупроводниковых микросхем. Эти проблемы являются актуальными для полупроводниковых пленок, широко используемых в микроэлектронике [1-3,5-7] и являются предметом изучения настоящего раздела.

В разделе 4.1 приведены выражения для длин свободного пробега фононов в монокристаллических наноструктурах. В разделе 4.2 проанализированы зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров в наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии. В разделе 4.3 исследовано влияние фокусировки на плотность состояний и длины свободного пробега фононов в нанопроводах с различным типом анизотропии упругой энергии. В разделе 4.4 рассмотрено изменение анизотропии теплопроводности при переходе от нанопроводов к квадратным пленкам с различной ориентацией плоскостей.

4.1. ДЛИНЫ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУРАХ

Проанализируем фононный транспорт в пленках длины L , имеющих прямоугольное сечение со сторонами D (толщина) и $W = \mu D$ (ширина). Для нанопроводов с квадратным сечением параметр $\mu = 1$. Исследуем теплопроводность наноструктур 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 $\kappa_{[I(\psi)]}^{\lambda \{J\}}(T) = (1/3)C_V(T) \bar{S} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda \{J\}}$ 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. При диффузном рассеянии фононов на границах средние длины пробега Λ , а также длины пробега Λ^λ фононов с поляризацией λ в пленках определены в работах [27]. При учете фокусировки фононов для направления потока тепла $[I(\psi)]$ и ориентации широкой грани пленки относительно осей кристалла $\{J\}$ их можно представить в виде

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

$$\Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda \{J\}} = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\langle (S^{\lambda})^{-2} \rangle} \int d\Omega_q \frac{I_{[I(\psi)]}^{\lambda \{J\}}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3},$$

Релаксационные функции $I_{[I(\psi)]}^{\lambda \{J\}}(\theta, \varphi)$ для пленок с прямоугольным сечением при выполнении неравенств $\mu |V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g1}^{\lambda}| \geq k_0 = L/2D$ или $\mu |V_{g1}^{\lambda}| < |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| \geq k_0/\mu$ определяются выражениями [27]

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

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

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

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

Здесь $V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{g1}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{g2}^\lambda(\theta, \varphi)$ – проекции групповой скорости на направление градиента температуры, и перпендикулярные ему направления в системе координат, связанной с пленкой. В этой системе координат ось «3» направим вдоль теплового потока $[I(\psi)]$. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно плоскости пленки, она определяет ориентацию плоскости $\{J\}$. Ось «2» направим перпендикулярно двум узким боковым граням пленки. Угол ψ отсчитывается от оси Z , направленной по ребру куба. Для учета влияния фокусировки фононов на анизотропию теплопроводности монокристаллических пленок выразим ориентационные параметры через компоненты групповой скорости.

В отличие от главы 3, здесь мы рассмотрим 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 $\{J\} = \{100\}$, (2) плоскость пленки совпадает с диагональной плоскостью $\{J\} = \{110\}$, (3) плоскость пленки перпендикулярна диагонали куба $\{J\} = \{111\}$. В последнем случае угол ψ отсчитывается от направления $[11\bar{2}]$. Для рассматриваемых случаев компоненты групповой скорости фононов $V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{g1}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{g2}^\lambda(\theta, \varphi)$ могут быть представлены в следующем виде [27]:

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

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

$$V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda - V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2},$$

$$\begin{aligned}
 (3) \quad V_{g^3}^\lambda &= (V_{gx}^\lambda - V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \left(- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda \right) \cos \psi, \\
 V_{g^2}^\lambda &= \left(-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda \right) \cos \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \left(- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda \right) \sin \psi, \\
 V_{g^1}^\lambda &= \left(V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda + V_{gz}^\lambda \right) / \sqrt{3}.
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Зависимость направления теплового потока от угла u определяется компонентой групповой скорости $V_{g^3}^\lambda$. Проекция групповой скорости $V_{g^1}^\lambda$ не зависит от угла u , поскольку является осью вращения. Она определяет плоскость пленки $\{J\}$. Итак, формулы (4.1)-(4.4) позволяют анализировать особенности фононного транспорта в нанопленках и нанопроводах с квадратным сечением при низких температурах. Необходимым условием правомерности такого подхода является применимость модели анизотропного континуума для анализа фононного транспорта в наноструктурах. Как уже отмечалось, для нанопроводов с диаметрами большими 50 нм и пленок с толщинами большими 20 нм влиянием пространственного конфайнмента на спектр акустических мод в наноструктурах можно пренебречь и использовать модель анизотропного континуума для анализа фононного транспорта. Расчеты температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок и нанопроводов в [23,24] подтвердили этот вывод.

В изотропных средах фазовые скорости фононов S^λ не зависят от углов θ и φ . Поэтому из формул (4.1) - (4.4) следует, что длины пробега фононов различных поляризацій равны друг другу и средней длине пробега:

$$\Lambda_{iso}^L = \Lambda_{iso}^t = \Lambda_{iso} = D \frac{3}{4\pi} \cdot \int d\Omega_q \tilde{I}(\theta, \varphi), \quad \tilde{I}(\theta, \varphi) = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{DS^\lambda}, \tag{4.5}$$

$$\tilde{\Lambda}_{iso} = \Lambda_{iso} / D,$$

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = k_0 |n_3| \left\{ 1 - \frac{k_0}{2\mu} \frac{|n_2| + \mu |n_1|}{|n_3|} + \frac{(k_0)^2}{3\mu} \frac{|n_1| |n_2|}{(n_3)^2} \right\}, \quad \text{при} \begin{cases} (\mu |n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3 / n_1| \geq k_0) \text{ или} \\ (\mu |n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3 / n_2| \geq k_0 / \mu) \end{cases},$$

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = \begin{cases} (n_3 / n_1)^2 (3\mu |n_1| - |n_2|) / 6\mu, & \text{при } \mu |n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3 / n_1| < k_0, \\ (n_3 / n_2)^2 (3|n_2| - \mu |n_1|) \mu / 6, & \text{при } \mu |n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3 / n_2| < k_0 / \mu. \end{cases}$$

Здесь n_1 , n_2 и n_3 – компоненты единичного волнового вектора \mathbf{n} . Как видно из выражений (4.5), 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 (4.5) следует результат Смолуховского [107] для длины пробега молекул при течении разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с прямоугольным сечением ($a \times b$):

$$\Lambda = \frac{3}{4}(ab)^{1/2} \left\{ \left(\frac{a}{b} \right)^{1/2} \ln \left[\frac{b}{a} + \sqrt{1 + \left(\frac{b}{a} \right)^2} \right] + \left(\frac{b}{a} \right)^{1/2} \ln \left[\frac{a}{b} + \sqrt{1 + \left(\frac{a}{b} \right)^2} \right] + \frac{1}{3} \left[\left(\left(\frac{a}{b} \right)^{3/2} + \left(\frac{b}{a} \right)^{3/2} \right) - \left(\frac{a+b}{b} + \frac{b}{a} \right)^{3/2} \right] \right\}. \quad (4.6)$$

Из формулы (4.6) для кнудсеновского течения фононного газа по бесконечному стержню с прямоугольным сечением ($a = D$ и $b = W = \mu D$) мы получаем результат МакКарди и др. [19] для длины Казимира

$$\Lambda = \frac{3}{4}(ab)^{1/2} \left\{ \left(\frac{a}{b} \right)^{1/2} \ln \left[\frac{b}{a} + \sqrt{1 + \left(\frac{b}{a} \right)^2} \right] + \left(\frac{b}{a} \right)^{1/2} \ln \left[\frac{a}{b} + \sqrt{1 + \left(\frac{a}{b} \right)^2} \right] + \frac{1}{3} \left[\left(\left(\frac{a}{b} \right)^{3/2} + \left(\frac{b}{a} \right)^{3/2} \right) - \left(\frac{a+b}{b} + \frac{b}{a} \right)^{3/2} \right] \right\}. \quad (4.7)$$

Для теплопроводности цилиндрического стержня бесконечной длины с диаметром d в модели изотропной среды следует результат Казимира [13]: $\Lambda_c = d$, что совпадает с результатом Кнудсена [12] для течения разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с круглым сечением. Эти совпадения не является случайным. Займан в монографии [8] (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], Смолуховский [615]).» Поэтому режим граничного рассеяния получил название кнудсеновского течения фононного газа [8,9,35].

4.2. ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА АНИЗОТРОПИЮ ДЛИН СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В ПЛЕНКАХ И НАНОПРОВОДАХ

Рассмотрим особенности фононного транспорта в монокристаллических пленках в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Ранее для оценок теплопроводности и длин свободного пробега фононов в монокристаллических пленках кубической симметрии для диффузного рассеяния на границах, как правило, использовалась модель изотропной среды и теория Казимира [см., например, 25,26,108]. В других работах (см., например, [5-7,28,29]) граничное рассеяние фононов в достаточно тонких пленках ($D \ll L, W$) учитывалось в модели изотропной среды аналогично тому, как это было сделано в работах Фукса [30] и Зондгеймера [31] при анализе проводимости тонких металлических пленок. При этом предполагалось, что длины свободного пробега и времена релаксации фононов в пленках зависят только от её толщины [5-7,28,29]. Этот результат является некорректным, как и попытка определить длины пробега фононов в нанопленках и нанопроводах при низких температурах в [108], исходя из результатов Казимира и соображений размерности. Авторы [108] предположили, что длина пробега фононов в пленке зависит только от её 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 [108] 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 [108] для анализа температурных зависимостей теплопроводности в кремниевых нанопленках и нанопроводах, исходя из аддитивности вкладов граничного и объёмных механизмов рассеяния.

В связи с этим «результатом» в работе Мариса и Тамуры [25] 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 ранее отмечалась в работе [32]. Действительно, из формулы (4.6) следует результат [25,32]

$$\tilde{\Lambda}_c(\mu) = \Lambda_c(\mu) / D \cong A + B \ln \mu, \quad \mu \gg 1, \quad A \approx 0.895, \quad B = 0.75, \quad (4.8)$$

где $\Lambda_c(\mu)$ - длина Казимира для пленки толщиной D и шириной μD . Как отмечалось в [25,32], логарифмическая расходимость (4.7) обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. Вопрос о влиянии конечной длины пленки на логарифмическую расходимость длин Казимира в работах [25,32] не рассматривался. Также не исследовались такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров пленок и направлений теплового потока. Эти проблемы являются актуальными для полупроводниковых пленок, широко используемых в микроэлектронике [1-3].

4.2.1. Длины Казимира в упруго анизотропных наноструктурах

Численный анализ теплопроводности с использованием выражений (4.1) - (4.3) показал, что длины Казимира для монокристаллических пленок также логарифмически расходятся, когда ширина пленки стремится к бесконечности [27]. Однако их значения для фононов различных поляризаций в отличие от изотропной среды значительно различаются (см. рис. 4.1). Кривая 5 на этом рисунке соответствует результату Мариса и Тамуры [25] для модели изотропной среды.

Как видно из рисунка 4.1а, 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 $W = \mu D$ ограничен ее дли-

ной. При значениях $W > 10L$ зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{i(j)}(\mu)$ выходят на насыщение (см. рис. 4.1). Из рисунка 4.1б явствует, что длины Казимира в монокристаллических пленках с ориентацией $\{J\} = \{100\}$ и направлением градиента температуры $[L] = [100]$ из кристаллов первого типа во всей области параметра μ оказываются больше, а в пленках

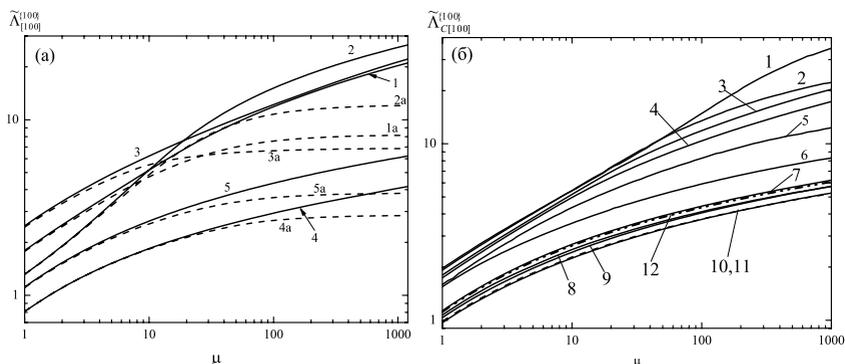


Рис. 4.1. (а) – Зависимости приведенных длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{i(100)}(\mu) = \Lambda_{[100]}^{i(100)}(\mu)/D$ (кривые 1 и 1а), а также длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{2(i100)}(\mu)$ в пленках германия от приведенной ширины [27].

Сплошные кривые (1, 2, 3, 4, 5) соответствуют длинам Казимира в наноструктурах с параметрами $W = \mu D$, $D = 50$ нм. Штриховые кривые (1а, 2а, 3а, 4а, 5а) соответствуют длинам пробега фононов в наноструктурах с параметрами $L = 100D$, $D = 50$ нм. Кривые (2, 2а) – $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{i(100)}(\mu)$, (3, 3а) – $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{2(i100)}(\mu)$, (4, 4а) – $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{L(i100)}(\mu)$. Кривые (5, 5а) относятся к модели изотропной среды, кривая 5 – результат Мариса и Тамуры [25] для длины Казимира.

(б) – Зависимости длин Казимира $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^{i(100)}(\mu)$ от приведенной ширины в наноструктурах с параметрами $W = \mu D$, $D = 50$ нм. Кривые: 1 – MgO, 2 – Si, 3 – Ge, 4 – GaAs, 5 – GaN, 6 – алмаз, 7 – YAG, 8 – YIG, 9 – NaCl, 10 – CaF₂, 11 – SrF₂ и 12 – модель изотропной среды [25]

из кристаллов второго типа - меньше, чем в модели изотропной среды. Для нанопроводов с квадратным сечением длины Казимира в значительной степени определяются эффектом фокусировки фононов и слабо зависят от ориентации боковых граней. Как видно из таблицы 4.1, они достигают максимальных значений в направлениях фокусировки фононов, в которых они превышают длины Казимира остальных колебательных мод, а также значение для изотропной среды $\tilde{\Lambda}_{C iso} \cong 1.115$. Так, например для Ge: $\tilde{\Lambda}_{C[111]}^L = 1.48$, $\tilde{\Lambda}_{C[110]}^1 = 1.85$ и $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^{i2} = 2.49$. Длины Казимира достигают минимальных значений в направлениях дефо-

кусировки, в которых они оказываются заметно меньше, чем для изотропных сред, например, для Ge: $\tilde{\Lambda}_{c[100]}^L = 0.81$, $\tilde{\Lambda}_{c[111]}^I = 0.7$ и $\tilde{\Lambda}_{c[110]}^I = 0.89$.

Таблица 4.1

Приведенные длины Казимира $\tilde{\Lambda}_{c[I(\psi)]}^2$ и $\tilde{\Lambda}_{c[I(\psi)]}$ в стержнях с квадратным сечением для симметричных направлений $[I(\psi)]$ [27]

| Соединение | $k-1$ | $[I(\psi)]$ | $\tilde{\Lambda}_{c[I(\psi)]}^L$ | $\tilde{\Lambda}_{c[I(\psi)]}^I$ | $\tilde{\Lambda}_{c[I(\psi)]}^2$ | $\tilde{\Lambda}_{c[I(\psi)]}$ | $\tilde{\Lambda}_{c[I(\psi)]}$ [19] |
|------------------|-------|-------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|--------------------------------|-------------------------------------|
| GaN | 1.28 | [100] | 0.76 | 1.39 | 1.92 | 1.59 | - |
| | | [110] | 1.30 | 1.46 | 0.94 | 1.16 | - |
| | | [111] | 1.67 | 0.78 | 1.12 | 1.07 | - |
| 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 |
| MgO | 0.70 | [100] | 0.85 | 1.25 | 2.92 | 1.96 | - |
| | | [110] | 1.21 | 2.04 | 0.90 | 1.38 | - |
| | | [111] | 1.40 | 0.79 | 1.30 | 1.13 | - |
| 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 | - |
| SrF ₂ | -0.20 | [100] | 1.35 | 0.82 | 1.04 | 0.99 | - |
| | | [110] | 1.07 | 2.33 | 1.00 | 1.55 | - |
| | | [111] | 1.00 | 1.06 | 1.98 | 1.48 | - |
| 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 |

При переходе к нанопроводам из кристаллов второго типа направления фокусировки и дефокусировки фононов и, соответственно, минимальные и максимальные значения длин Казимира меняются местами. Например, для NaCl минимальные значения $\tilde{\Lambda}_C^L = 0.86$, $\tilde{\Lambda}_C^{I1} = 0.81$ и $\tilde{\Lambda}_C^{I2} = 0.94$ имеют место в тех направлениях, где для Ge имели место максимальные, а максимальные значения реализуются в направлениях, где для Ge имели место минимумы длин пробега (см. таблицу 4.1). Следует учесть, что в кристаллах первого и второго типа поперечные моды t_1 и t_2 также меняются местами [44]. Отметим, что для нанопроводов с существенной анизотропией упругой энергии (GaAs, Ge, LiF, Si) значения минимальных и максимальных длин Казимира существенно отличаются от величины $\tilde{\Lambda}_{C\ iso}$. Однако для кристаллов YAG и YIG со слабой анизотропией упругой энергии ($|k-1| < 1$) они близки к значениям $\tilde{\Lambda}_{C\ iso}$ (см. таблицу 4.1). При этом для каждой моды в зависимости от направления они могут иметь значения как большие, так и меньшие, чем $\tilde{\Lambda}_{C\ iso}$. Как видно из таблицы 4.1, наши результаты для длин Казимира в симметричных направлениях согласуются с полученными в [19] в пределах погрешности 1-4 %. Для изотропных сред длины свободного пробега в режиме граничного рассеяния определяются полностью геометрическими параметрами наноструктур. Поэтому они могут быть использованы в качестве удобной системы сравнения для длин Казимира $\tilde{\Lambda}_{C\{I\}}^{\{J\}}(\mu)$ в упруго анизотропных кристаллах при изменении направления теплового потока или при сравнении длин Казимира в наноструктурах, выполненных из различных материалов (см. рис. 4.1, 4.2).

Проведенный анализ показал, что длины Казимира для монокристаллических пленок определяются не только геометрическими параметрами, но и в значительной степени зависят от направления теплового потока и ориентации плоскости пленки, т. е. $\tilde{\Lambda}_C(\mu) \Rightarrow \tilde{\Lambda}_{C\{I\}}^{\{J\}}(\mu)$. В предельном случае $\mu \gg 1$ длины Казимира $\tilde{\Lambda}_{C\{I\}}^{\{J\}}(\mu)$ могут быть представлены в виде (4.7). При этом значения коэффициентов A и B становятся зависящими от ориентационных параметров $[I(\psi)]$ и $\{J\}$.

4.2.2. Зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров в наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии

Проанализируем зависимости теплопроводности и длин свободного пробега фононов в пленках из кристаллов первого и второго типа от

геометрических параметров для различных значений параметра анизотропии $k - 1$ и ориентаций плоскостей $\{J\}$. Для этого зафиксируем направление градиента температуры и рассмотрим зависимости теплопроводности от приведенной ширины пленки $\mu = W/D$ при $L/D = 100$ ($k_0 = 50$) для различных ориентаций плоскостей пленок $\{J\}$. Оценки показывают, что для нанопроводов с квадратным сечением ($\mu = 1$) отличие средних длин пробега для ориентации боковых граней $\{J\} = \{100\}$ и $\{J\} = \{110\}$ составляет менее 1.3%. Поэтому для них зависимости теплопроводности от ориентаций боковых граней для всех рассмотренных кристаллов малы, и ими можно пренебречь.

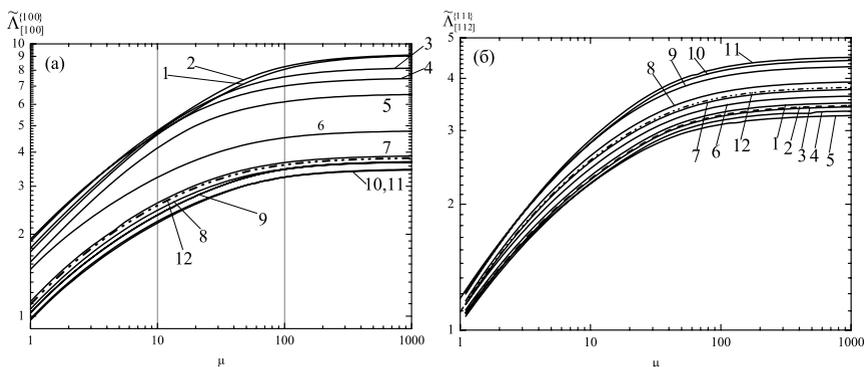


Рис. 4.2. Зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\lambda}_{[100]}^{(100)}(\mu)$ пленок с длиной $L = 100D$, $D = 50$ нм от параметра μ (а) для ориентации плоскости пленки $\{100\}$ и направления градиента температур $[100]$, (б) для ориентации плоскости пленки $\{111\}$ и направления градиента температур $[11\bar{2}]$. Кривые: 1 – MgO, 2 – Si, 3 – Ge, 4 – GaAs, 5 – GaN, 6 – алмаз, 7 – YAG, 8 – YIG, 9 – NaCl, 10 – CaF₂ и 11 – SrF₂, 12 – модель изотропной среды

Однако в достаточно широких монокристаллических пленках значения длин пробега фононов в значительной степени определяются ориентацией плоскости. Для всех материалов длины пробега в монокристаллических пленках возрастают с увеличением их ширины. Как видно из рисунка 4.2а, для ориентации плоскости $\{J\} = \{100\}$ и направления градиента температур $[L] = [100]$ длины пробега в пленках из кристаллов первого типа оказываются больше, а в кристаллах второго типа – меньше, чем в изотропных средах. В этом случае мы имеем возможность проследить, как изменяются длины пробега фононов в до-

статочны широких пленках в зависимости от значений параметра анизотропии $k - 1$.

Следует отметить, зависимость длин свободного пробега от параметра анизотропии $k - 1$ не является монотонно возрастающей, хотя при малых значениях этого параметра такая зависимость имеет место. Так, например, при переходе от изотропной среды ($k - 1 = 0$) к кристаллам YAG ($k - 1 = 0.03$) и алмазу ($k - 1 = 0.4$) значения длин пробега в пленках при фиксированном значении ширины пленки возрастают (см. рис. 4.2а). Казалось бы, далее должны следовать длины пробега для пленок из кристаллов Si ($k - 1 = 0.67$) и MgO ($k - 1 = 0.69$). Однако на самом деле следующую ступеньку занимают длины пробега для пленок из кристаллов GaN ($k - 1 = 1.275$) со значительно большим параметром анизотропии. А длины пробега для пленок из Si и MgO имеют максимальные значения из рассмотренных материалов. Ниже их располагаются длины пробега в пленках из Ge ($k - 1 = 0.87$) и GaAs ($k - 1 = 0.9$), параметры анизотропии которых заметно больше, чем в Si (см. рис. 4.2а). Такая иерархия длин пробега в пленках обусловлена влиянием фокусировки фононов на плотность состояний и длины пробега квазипоперечных мод, которые вносят основной вклад в теплопроводность пленок и, соответственно, в средние длины пробега.

В кристаллах с малой анизотропией упругой энергии алмаз, YAG, YIG и в изотропных средах для поперечных мод отсутствуют области с отрицательной кривизной на изоэнергетических поверхностях, и изменения фононных плотностей состояний относительно невелики. Они могут быть описаны с помощью «фактора усиления» (см. раздел 1.6). Для остальных кристаллов первого типа с большими значениями параметра $k - 1$ на изоэнергетических поверхностях имеют место области с отрицательной кривизной. В этом случае сектор фокусировки фононов определяется углами $2\theta_3$, и этот сектор собирает в себя все состояния с волновыми векторами в секторе $2\theta_4$ (см. раздел 1.5). Чем меньше угол $2\theta_3$, тем больше оказывается плотность состояний в области фокусировки фононов (см. рис. 1.18). Наименьшие значения углов θ_3 и наибольшее изменение плотности состояний имеют место для Si и MgO с относительно небольшим значением параметра $k - 1$ (см. таблицу 1.6). С увеличением параметра $k - 1$ значения углов θ_3 , определяющих область фокусировки фононов возрастает, а величины плотности состояний для этих кристаллов уменьшаются. Это приводит к уменьшению

вклада рассматриваемой моды в теплопроводность пленки и, соответственно, к уменьшению значений длин пробега в пленках при переходе от кристаллов Ge с $k - 1 = 0.87$ к GaN с параметром анизотропии $k - 1 = 1.275$ (см. рис. 4.2а). Для кристаллов второго типа кривые зависимости длин пробега от ширины пленки располагаются ниже кривой, соответствующей модели изотропной среды. Для пленок на основе YIG с $k - 1 = -0.04$ зависимости длин пробега близки к модели изотропной среды и зависимостям для пленок на основе NaCl ($k - 1 = -0.48$). Для пленок на основе кристаллов CaF_2 ($k - 1 = -0.33$) и SrF_2 ($k - 1 = -0.2$) кривые 10 и 11 практически идут друг по другу и расположены заметно ниже, чем для модели изотропной среды.

Как видно из рисунка 4.2б, для ориентации плоскости пленки $\{J\} = \{111\}$ и направления градиента температуры $[I] = [11\bar{2}]$ ситуация с длинами пробега в кристаллах первого и второго типа кардинально меняется по сравнению с рассмотренным случаем ориентации плоскостей пленок $\{100\}$. В кристаллах второго типа они оказываются больше, а в кристаллах первого типа – меньше, чем в изотропных средах. Максимальные значения длины пробега для пленок с ориентацией $\{111\}$ и направлением теплового потока $[11\bar{2}]$ имеют место для кристалла второго типа CaF_2 , а минимальное – для пленок GaN с максимальным значением параметра анизотропии из рассмотренных кристаллов первого типа. Причем, в данном случае для кристаллов первого типа последовательность кривых обратная их значениям параметра анизотропии $k - 1$. Самая верхняя кривая 7, примыкающая к зависимости для модели изотропной среды, имеет место для пленок YAG, а нижняя кривая 5 - для пленок GaN.

Рассмотрим зависимости длин свободного пробега фононов в пленках с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ от приведенной длины $k_0 = L/2D$. Сравним эти зависимости для нанопроводов ($\mu = 1$) и достаточно широких пленок с $\mu = 100$. Как видно из рисунка 4.3а, с увеличением длины наноструктур величины теплопроводности и длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I]}^{(J)}(k_0, \mu)$ в пленках с ориентациями $\{100\}$ и направлением теплового потока $[100]$ возрастают тем быстрее, чем больше значения параметра μ (см. рис. 4.3). При длинах пленок, превышающих их ширину на два порядка величины, зависимости длин пробега фононов выходят на насыщение. Отметим, что для кристаллов YAG и YIG со слабой анизотропией упругой энергии ($|k - 1| \ll 1$) зависимости длин

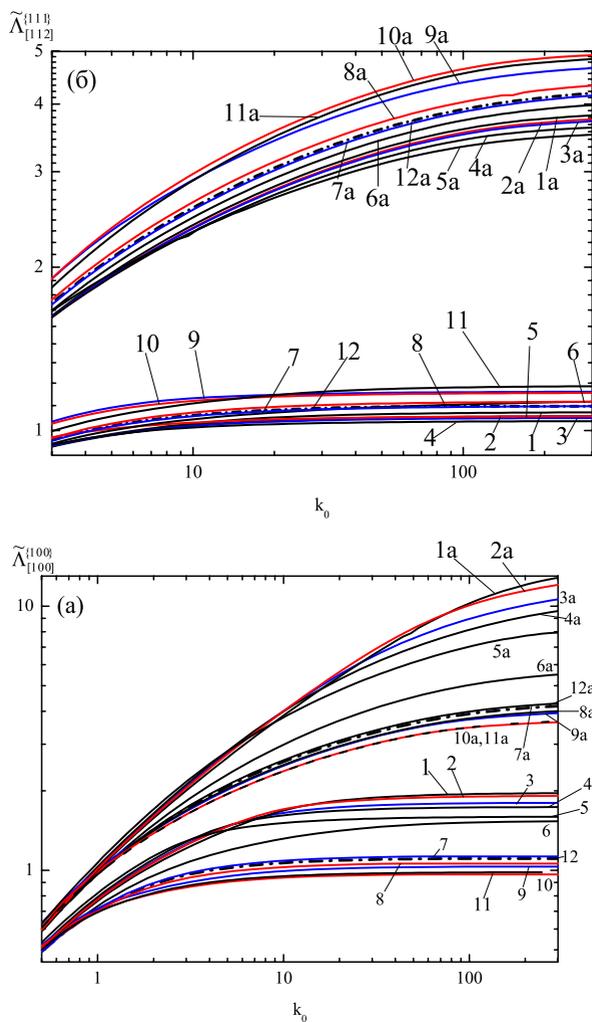


Рис. 4.3. Зависимости приведенных длин свободного пробега от параметра $k_0 = L/2D$ для наноструктур с толщиной $D=50$ нм на основе кристаллов MgO – (1,1a), Si – (2,2a), Ge – (3,3a), GaAs – (4,4a), GaN – (5,5a), алмаз – (6,6a), YAG – (7,7a), YIG – (8,8a), NaCl – (9,9a), CaF₂ – (10,10a), SrF₂ – (11,11a), изотропная среда – (12,12a). Кривые 1-12 относятся к нанопроводам ($\mu = 1$), кривые 1a-12a относятся к пленкам ($\mu = 100$) для случаев: а) ориентация плоскости пленки {100} и градиент температуры вдоль [100]; б) ориентация плоскости пленки {111} и градиент температуры вдоль [112]

пробега $\tilde{\Lambda}_{[1]}^{(j)}(k_0, \mu)$ от k_0 мало отличаются друг от друга и модели изотропной среды (см. рис. 4.3). Обращает на себя внимание качественное отличие зависимостей $\tilde{\Lambda}_{[1]}^{(j)}(k_0, \mu)$ от k_0 в пленках и нанопроводах для ориентаций $\{100\}$ и $\{111\}$. Для пленок с плоскостью $\{100\}$ и направлением теплового потока $[100]$ значения длин свободного пробега в кристаллах первого (GaN, GaAs, Ge, MgO, Si, алмаз, YAG) оказываются выше, чем в изотропных средах, как в нанопленках, так и в нанопроводах (см. рис. 4.3). Тогда, как для кристаллов второго типа (NaCl, CaF₂, SrF₂, YIG) в этом случае они оказываются ниже, чем в изотропных средах. Причем, последовательность кривых на рисунках 4.3а от приведенной длины пленки совпадает с последовательность кривых на рисунках 4.2а для зависимостей длин пробега от приведенной ширины пленки. Максимальные значения длины пробега из рассмотренных материалов для обеих зависимостей имеют место для пленок из кристаллов первого типа Si и MgO, а минимальные - для пленок из кристаллов второго типа CaF₂.

Как видно из рисунка 4.3б, в пленках с ориентациями плоскостей $\{J\} = \{111\}$ и направлением градиента температуры $[11\bar{2}]$ последовательность длин пробега в значительной мере становится обратной по отношению к пленкам с ориентацией $\{100\}$. В кристаллах второго типа они оказываются больше, а в кристаллах первого типа – меньше, чем в изотропных средах. Аналогично рассмотренным ранее зависимостям длин пробега от ширины пленок (см. рис 4.2б) максимальные значения длин пробега от приведенной длины для пленок с ориентацией $\{111\}$ и направлением теплового потока $[11\bar{2}]$ достигаются для кристалла второго типа CaF₂, а минимальное – для пленок GaN. Последовательность кривых на рисунках 4.3б от приведенной длины пленки совпадает с последовательностью кривых на рисунках 4.2б для зависимостей длин пробега от приведенной ширины пленки.

4.2.3. Зависимости анизотропии теплопроводности от длин монокристаллических пленок

Проанализируем изменение анизотропии фононного транспорта в плоскости пленки в зависимости от её длины для различных соединений. Для этого зафиксируем ширину пленки $W = 100 D$ ($\mu = 100, D = 50$ нм) и построим зависимости длин пробега фононов от приведенной длины

$k_0 = L/2D$ для направлений теплового потока, обеспечивающих фокусировку и дефокусировку акустических мод. В разделе 2.3 было показано (см. также [20]), что длины свободного пробега в объёмных материалах достигают максимальных значений в направлениях фокусировки фононов, а минимальных значений – в направлениях дефокусировки. Поэтому, если рассчитанные значения длин свободного пробега для этих направлений в пленках с конкретным соотношением геометрических параметров будут совпадать, то можно ожидать, что в этой области параметров их зависимости в плоскости пленки будут изотропны. Если они будут различаться, то, соответственно, длины пробега в плоскости пленки будут анизотропны. Отметим, что в пленках с ориентацией $\{100\}$ из кристаллов первого типа медленная поперечная мода фокусируется и дефокусируется в направлениях $[100]$ и $[110]$, напротив, для пленок из кристаллов второго типа быстрая поперечная мода в этих направлениях дефокусируется и фокусируется.

Для быстрой и медленной поперечных мод в пленках с ориентацией плоскости $\{111\}$ локальные максимумы и минимумы фокусировки реализуются в направлениях типа $[11\bar{2}]$ и $[110]$. Поэтому мы рассчитали зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(w)]}^{\lambda\{j\}}(k_0) = \Lambda_{[l(w)]}^{\lambda\{j\}}(k_0) / D$, нормированных на толщину пленки, от приведенной длины k_0 для этих направлений (см. [70]). Из рисунков 4.4 видно, что зависимости длин свободного пробега для различных колебательных мод в пленках с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ для всех материалов являются возрастающими функциями длины образца. С увеличением длины пленки при $L > 100W$ они выходят на насыщение. Для коротких пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$, длина которых меньше или равна её ширине ($L \leq W$), зависимости длин свободного пробега в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов для всех акустических мод отличаются незначительно. В любом случае при $k_0 = 50$ ($L = W$) эти зависимости пересекаются, и следует ожидать, что для квадратных пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ угловые зависимости теплопроводности будут изотропными. А для коротких пленок с $L < W$ следует ожидать, что угловые зависимости длин пробега и теплопроводности в плоскости пленок будут почти изотропными.

Однако увеличение длины пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ при $L > W$ ($k_0 > 50$) приводит к тому, что значения длин пробега для

направлений фокусировки становятся заметно больше, чем для направлений дефокусировки фононов. При этом анизотропия длин пробега возрастает, и при $L > 10^2 W$ она достигает максимальных значений (см. рис. 4.4). Так, например, для пленок Ge, Si с ориентацией $\{100\}$ в направлении фокусировки длины пробега медленной, а для пленок

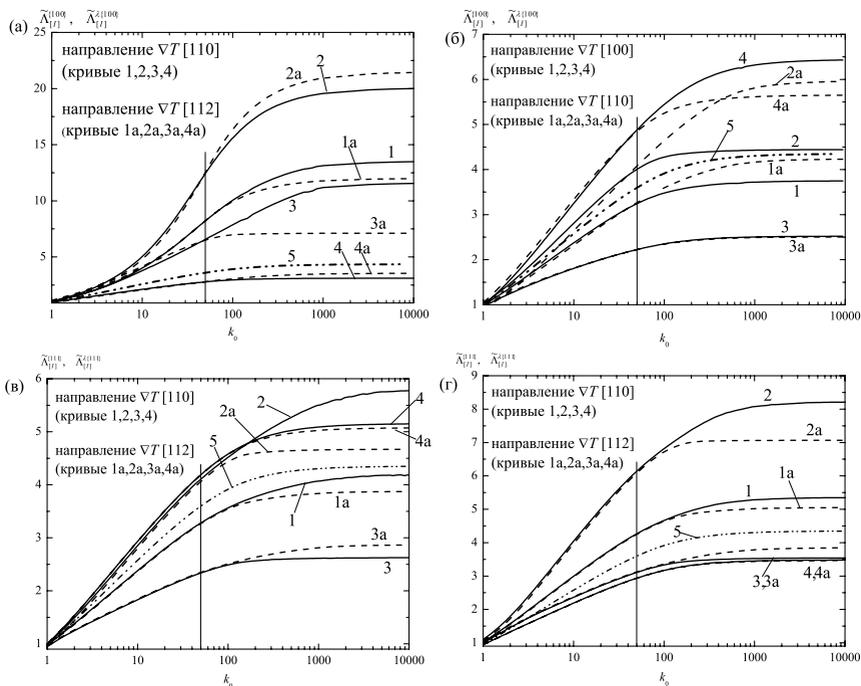


Рис. 4.4. Зависимости приведенных средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[l]}^{(100)}(k_0)$ (кривые 1 и 1a), а также длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[l]}^{\lambda(100)}(k_0)$ в пленках Si (а,в) и CaF_2 (б,г) с ориентацией плоскости пленки $\{100\}$ (а,б) и $\{111\}$ (в,г) от приведенной длины k_0 [30]. Кривые (2, 2a) – для быстрой поперечной моды, (3, 3a) – для моды t_2 , (4, 4a) – для продольных фононов, кривая 5 – для модели изотропной среды

CaF_2 быстрой поперечной моды оказываются больше, чем в направлении дефокусировки в 1.65, 1.62 и 1.34 раза, соответственно. Для быстрых поперечных мод в пленках с ориентацией $\{100\}$ из кристаллов первого типа анизотропия длин пробега при $L > 100 W$ мала: она составля-

ет 2% - 3% для кристаллов Ge и GaAs и увеличивается до 9% для InSb (см. таблицу 4.3). Исключение представляют пленки MgO: в них длины пробега для моды t_1 в направлениях [100] оказываются в 1.33 раза меньше, чем для направления [110] (см. таблицу 4.2). Для моды t_1 в пленках CaF₂ и NaCl ситуация с анизотропией длин пробега $\Lambda_{[l]}^{l\{100\}}$ оказывается подобной пленкам MgO: в них длины пробега в направлении [110] оказываются больше, чем в [100] в 1.34 и 1.30 раза (см. таблицу 4.2).

Таблица 4.2

Анизотропия длин свободного пробега в пленках с параметрами $L=100W$, $W=100D$ и $D=50$ нм

| $\Lambda_{[l_1]}^{\lambda\{J\}} / \Lambda_{[l_2]}^{\lambda\{J\}}$ | GaAs | Ge | InSb | GaN | LiF | MgO | Si | ал-маз | CaF ₂ | NaCl |
|---|------|------|------|------|------|------|------|--------|------------------|------|
| $\Lambda_{[110]}^{L\{100\}} / \Lambda_{[100]}^{L\{100\}}$ | 1.18 | 1.16 | 1.18 | 1.21 | 1.15 | 1.13 | 1.13 | 1.08 | 0.88 | 0.82 |
| $\Lambda_{[110]}^{L\{111\}} / \Lambda_{[11\bar{2}]}^{L\{111\}}$ | 1.04 | 1.02 | 1.03 | 1.05 | 1.02 | 1.01 | 1.02 | 1.00 | 1.00 | 1.02 |
| $\Lambda_{[110]}^{l\{100\}} / \Lambda_{[100]}^{l\{100\}}$ | 1.02 | 1.03 | 1.09 | 1.04 | 1.06 | 1.33 | 1.07 | 1.01 | 1.34 | 1.30 |
| $\Lambda_{[110]}^{l\{111\}} / \Lambda_{[11\bar{2}]}^{l\{111\}}$ | 1.27 | 1.23 | 1.18 | 1.15 | 1.27 | 1.16 | 1.27 | 1.09 | 1.16 | 1.12 |
| $\Lambda_{[100]}^{r2\{100\}} / \Lambda_{[110]}^{r2\{100\}}$ | 1.52 | 1.65 | 1.33 | 1.22 | 1.67 | 1.67 | 1.62 | 1.24 | 1.01 | 1.01 |
| $\Lambda_{[11\bar{2}]}^{r2\{111\}} / \Lambda_{[110]}^{r2\{111\}}$ | 1.13 | 1.09 | 1.09 | 1.05 | 1.09 | 1.11 | 1.09 | 1.07 | 1.09 | 1.07 |
| $\Lambda_{[100]}^{\{100\}} / \Lambda_{[110]}^{\{100\}}$ | 1.21 | 1.21 | 1.16 | 1.13 | 1.16 | 1.05 | 1.12 | 1.08 | 0.89 | 0.93 |
| $\Lambda_{[110]}^{\{111\}} / \Lambda_{[11\bar{2}]}^{\{111\}}$ | 1.08 | 1.08 | 1.06 | 1.05 | 1.09 | 1.05 | 1.1 | 1.02 | 1.06 | 1.04 |

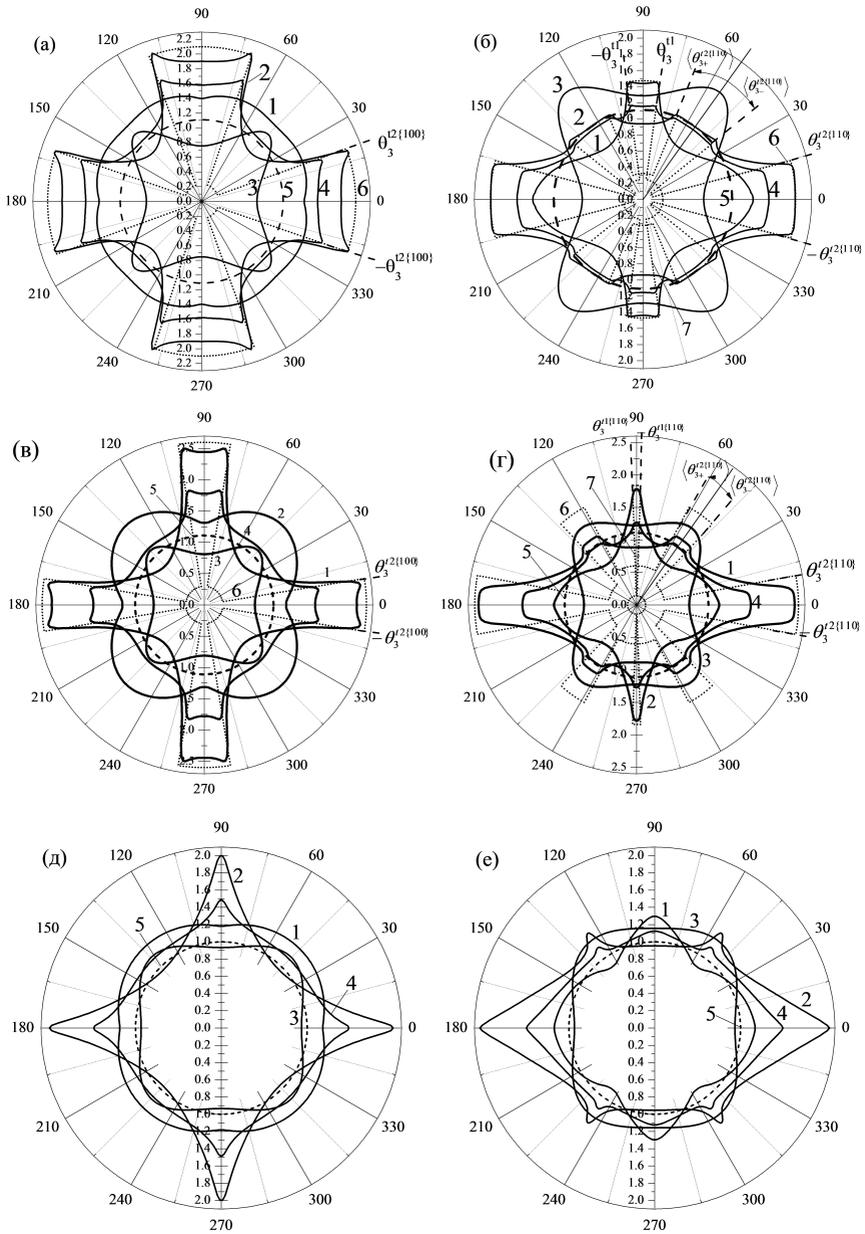
При переходе к пленкам с плоскостью {111} анизотропия полной теплопроводности уменьшается, она не превышает 10%. Этот результат обусловлен фокусировкой и дефокусировкой быстрой и медленной поперечных мод, которые вносят основной вклад в полную теплопроводность и среднюю длину свободного пробега. Дело в том, что быстрая поперечная мода фокусируется и дефокусируется в направлениях [110] и [11 $\bar{2}$]. В противоположность этому медленная поперечная мода дефокусируется в направлении [110], а в [11 $\bar{2}$] она имеет локальный максимум фокусировки. Поэтому за счет взаимной компенсации этих

вкладов результирующая анизотропия полной теплопроводности оказывается малой. Для пленок на основе кристаллов GaAs, InSb, LiF, алмаза и CaF_2 , NaCl зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров подобны рассчитанным для пленок Si и CaF_2 (см. таблицу 4.2). При $L \leq W$ эти зависимости в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов для каждой колебательной моды практически совпадают. А при $L > 100W$ они становятся анизотропными. Параметры анизотропии длин пробега для исследованных пленок приведены в таблице 4.2.

4.3. ВЛИЯНИЕ ФОКУСИРОВКИ НА ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И ДЛИНЫ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В НАНОПРОВОДАХ С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ АНИЗОТРОПИИ УПРУГОЙ ЭНЕРГИИ

Рассмотрим фононный транспорт в монокристаллических нанопроводах при низких температурах, когда теплосоппротивление обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. Поскольку анизотропия длин свободного пробега и плотности фононных состояний обусловлена фокусировкой фононов, то проанализируем корреляцию этих величин для поперечных мод в нанопроводах с различным типом анизотропии упругой энергии. Для этого рассчитаем угловые зависимости длин пробега фононов для случаев, когда тепловой поток вращается в плоскости грани куба YZ $\{J\} = \{100\}$ или в диагональной плоскости $\{J\} = \{110\}$, и сравним с угловыми зависимостями плотностей фононных состояний для поперечных мод [71]. Как видно из рисунка 4.5, угловые зависимости длин пробега и плотностей фононных состояний для быстрых и медленных поперечных мод в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ хорошо коррелируют друг с другом: области максимальных и минимальных значений обеих величин для всех кристаллов определяются секторами фокусировки и дефокусировки фононов, соответственно, (см. раздел 1.5). При этом их максимальные значения ограничены углами $\pm \theta_3^{\lambda, J}$ относительно направления фокусировки, которые определяют направления групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности.

В нанопроводах на основе кристаллов первого типа Ge, Si, GaSb, LiF, GaAs и GaN для анизотропии теплопроводности и длин пробега фононов различных поляризаций мы получили близкие результаты. Длины пробега фононов для них принимают максимальные и минимальные значения в секторах фокусировки и дефокусировки фононов, соответственно. Причем, их значения для каждой колебательной моды в областях фокусировки превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод, а также длину пробега в модели изотропной среды (см. пунктирные кривые 5 на рис. 4.5). Тогда как в секторах дефокусировки их значения оказываются меньше, чем в модели изотропной среды. Во всех нанопроводах на основе кристаллов первого типа максимальные значения теплопроводности достигаются в направлениях [100] или близких к ним и обеспечиваются медленной поперечной модой. Так, например, для волновых векторов в плоскости грани куба медленная поперечная мода фокусируется в направлениях типа [100] и её длина пробега для Ge и GaAs в 3.0 и 2.8 раза больше, чем для продольных фононов и в 2.2 и 2.0 раза больше, чем в модели изотропной среды. Для наноструктур с большими значениями параметра анизотропии GaN, Ge, GaSb, LiF, GaAs максимумы длин пробега, а также ПФС квазипоперечной моды t_2 достигаются как раз при углах $\psi = n\pi/2 \pm \theta_3$, которые определяют направления групповых скоростей в точках нулевой кривизны. А непосредственно в направлениях фокусировки [100] длины пробега имеют локальный минимум. Наиболее четко этот минимум проявляется для нанопроводов из GaN, имеющих максимальное значение параметра анизотропии $k-1$: длина пробега моды t_2 в минимуме на 11% меньше, чем при углах $\pm \theta_3$ (см. рис. 4.5). В отличие от вышеупомянутых кристаллов, в нанопроводах на основе алмаза с меньшим значением параметра анизотропии длины пробега для медленной моды достигают резкого максимума непосредственно в направлениях [100] (см. рис. 4.5). Для него длина пробега оказалась в 1.8 раза больше, чем для изотропной среды и в 1.7 и 2.2 раза больше, чем для быстрой поперечной моды и продольных фононов, соответственно. Итак, для всех кристаллов, имеющих области отрицательной кривизны на изоэнергетических поверхностях, угловые зависимости ПФС и длин пробега в нанопроводах для быстрых и медленных поперечных мод в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ коррелируют между собой: их максимальные и минимальные значения достигаются в одних и тех же интервалах углов.



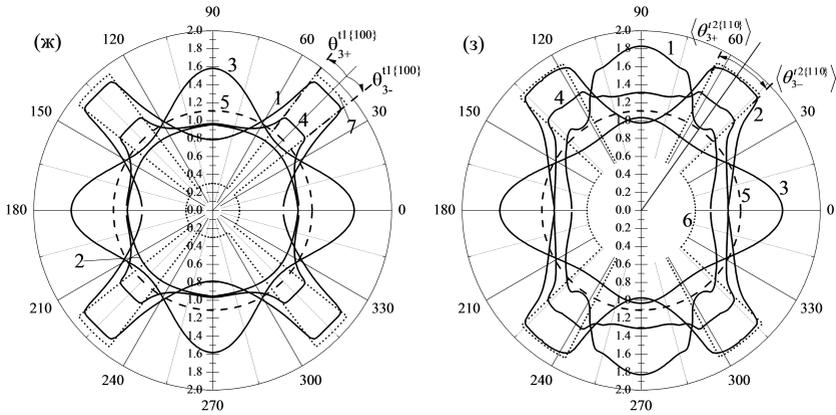


Рис. 4.5. Угловые зависимости длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{2,\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{2,\{J\}} / D$ и $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\{J\}} / D$ в GaN (а,б), Ge (в,г) алмаз (д,е) и CaF₂ (ж,з) для образцов с квадратным сечением $D = 50$ нм и длиной $L = 100D$ в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости грани куба (а,в,д,ж) и в диагональной плоскости (б,г,е,з). 1 – быстрая поперечная мода, 2 – медленная поперечная мода, 3 – продольная мода, 4 – средняя длин свободного пробега [71]. Пунктирная кривая 5 – для изотропной среды ($\Lambda_{iso} = 1.11D$). Штриховые линии 6 и 7 иллюстрируют угловое распределение плотностей состояний для медленных и быстрых поперечных мод в плоскостях {100} и {110}

Эти интервалы определяются направлениями групповых скоростей в точках нулевой кривизны (см. рис. 4.5).

Максимальная анизотропия решёточной теплопроводности (71%) имеет место для Si, а минимальная (31%) для нанопроводов из алмаза (см. таблицу 4.3). Для нанопроводов из кристаллов Ge, GaAs, GaS, LiF максимальные значения теплопроводности на 60% больше минимальных в направлениях [111]. Однако для наиболее анизотропного материала GaN анизотропия теплопроводности заметно меньше - 47%. Максимумы теплопроводности во всех материалах обеспечиваются медленной квазипоперечной модой. Хотя максимум параметра анизотропии $k-1$ (из кристаллов с областью отрицательной кривизны на изоэнергетической поверхности) имеет место для кристаллов GaN, а минимум - для Si, однако максимальная анизотропия теплопроводности из рассмотренных наноструктур имеет место для кристаллов Si. Изоэнергетическая поверхность для моды t_2 в Si имеет минимальную вогну-

тость и, соответственно, минимальные значения угла $\theta_3^{r2\{100\}}$ (см. таблицу 1.5). Поэтому в кристаллах Si у моды t_2 отношения плотностей фононных состояний для областей фокусировки и дефокусировки фононов в плоскости $\{100\}$ имеет наибольшее значение из рассмотренных кристаллов первой группы (см. таблицу 1.5).

Таблица 4.3

Отношения длин свободного пробега в симметричных направлениях для нанопроводов с квадратным сечением $D = 50$ нм и длиной $L=100D$ из Ge, Si, GaSb, LiF, GaAs и алмаза [71]

| Отношения длин пробега | Ge | Si | GaSb | GaN | LiF | GaAs | Алмаз |
|---|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $\Lambda_{[100]}^{(110)} : \Lambda_{[110]}^{(110)} : \Lambda_{[111]}^{(110)}$ | 1.61:1.16:1 | 1.71:1.18:1 | 1.61:1.15:1 | 1.47:1.08:1 | 1.65:1.17:1 | 1.60:1.20:1 | 1.31:0.98:1 |
| $\Lambda_{[100]}^{r2\{100\}} : \Lambda_{[111]}^{r2\{100\}} : \Lambda_{[110]}^{r2\{100\}}$ | 2.76:1.38:1 | 3.01:1.40:1 | 2.58:1.33:1 | 2.02:1.18:1 | 2.92:1.41:1 | 2.56:1.33:1 | 2.14:1.41:1 |
| $\Lambda_{[110]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[111]}^{L\{100\}}$ | 2.31:1.65:1 | 2.34:1.61:1 | 2.21:1.69:1 | 1.84:1.75:1 | 2.34:1.62:1 | 2.19:1.74:1 | 1.50:1.35:1 |
| $\Lambda_{[111]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[110]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{L\{100\}}$ | 1.79:1.51:1 | 1.65:1.43:1 | 1.83:1.53:1 | 2.16:1.70:1 | 1.72:1.47:1 | 1.86:1.55:1 | 1.34:1.24:1 |

Следует отметить, что преобладающий вклад в теплопроводность рассматриваемых наноструктур вносят квазипоперечные моды (см. таблицу 4.4). Для нанопроводов из кристаллов первого типа их вклад в

Таблица 4.4

Вклад колебательных мод в теплопроводность нанопроводов из кристаллов первого типа с $D = 50$ нм и длиной $L = 100 D$ в симметричных направлениях (%) [71]

| Направление градиента температуры | Si | | | Ge | | | GaSb | | | GaN | | | LiF | | | GaAs | | | Алмаз | | |
|-----------------------------------|----|-------|-------|----|-------|-------|------|-------|-------|-----|-------|-------|-----|-------|-------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 |
| [100] | 7 | 25 | 68 | 7 | 27 | 66 | 6 | 28 | 66 | 6 | 30 | 64 | 7 | 26 | 67 | 7 | 28 | 65 | 12 | 30 | 58 |
| [110] | 14 | 53 | 33 | 15 | 52 | 33 | 14 | 50 | 36 | 14 | 43 | 43 | 15 | 53 | 32 | 14 | 50 | 36 | 19 | 45 | 36 |
| [111] | 19 | 27 | 54 | 20 | 26 | 54 | 19 | 26 | 55 | 20 | 25 | 55 | 20 | 26 | 54 | 20 | 26 | 54 | 21 | 29 | 50 |

направлении теплового потока [100] составляет от 93 до 94% полной теплопроводности, только в нанопроводах из алмаза он уменьшается

до 88%. При этом вклад моды t_2 в теплопроводность нанопроводов из кристаллов первого типа с областью отрицательной кривизны на изоэнергетической поверхности в направлении фокусировки [100] составляет 68% для Si и уменьшается до 64% в GaN, а в нанопроводах из кристаллов алмаза - до 58% (см. таблицу 4.4). Как видно из таблицы 4.4, в направлениях [110] доминирующий вклад в теплопроводность вносит мода t_1 , а в направлениях [111] - мода t_2 , вклад которой превосходит 50%. Вклад продольных фононов мал: для нанопроводов из анизотропных кристаллов в направлении дефокусировки [100] он составляет 6-7%, а в направлении фокусировки [111] возрастает в 3 раза и составляет 19-20%. Для алмаза он увеличивается до 21%.

Для нанопроводов из кристаллов второго типа отношения длин свободного пробега в симметричных направлениях приведены в таблице 4.5. Максимумы теплопроводности обеспечиваются медленной квазипоперечной модой и достигаются в направлениях типа [111], а минимумы - в направлении [100]. Как видно из рисунка 4.5 (г), зависимости ПФС и длин пробега медленной моды хорошо коррелируют друг с другом.

Таблица 4.5

Отношения длин свободного пробега в симметричных направлениях для нанопроводов из кристаллов второго типа с квадратным сечением $D = 50$ нм и длиной $L=100D$ [71]

| Отношения длин пробега | SrF ₂ | CaF ₂ | PbS |
|---|------------------|------------------|-------------|
| $\Lambda_{[111]}^{\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{\{110\}} : \Lambda_{[100]}^{\{110\}}$ | 1.47:1.44:1 | 1.49:1.35:1 | 1.39:1.20:1 |
| $\Lambda_{[111]}^{t2\{110\}} : \Lambda_{[100]}^{t2\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{t2\{110\}}$ | 1.93:1.04:1 | 1.88:1.00:1 | 1.71:0.95:1 |
| $\Lambda_{[110]}^{t1\{110\}} : \Lambda_{[111]}^{t1\{110\}} : \Lambda_{[100]}^{t1\{110\}}$ | 2.45:1.30:1 | 2.35:1.46:1 | 1.99:1.53:1 |
| $\Lambda_{[100]}^L\{110\} : \Lambda_{[110]}^L\{110\} : \Lambda_{[111]}^L\{110\}$ | 1.34:1.07:1 | 1.72:1.12:1 | 2.26:1.18:1 |

Максимальная анизотропия решёточной теплопроводности нанопроводов – 49% имеет место для CaF₂, а минимальная – 39% для PbS (см. таблицу 4.5). Быстрая поперечная мода играет меньшую роль в теплопроводности наноструктур из кристаллов второго типа. Она фо-

кусируется в направлениях типа [110] и обеспечивает максимальные значения ПФС и длин свободного пробега в интервалах углов $[n\pi/4 - \theta_3^{1(100)}, n\pi/4 + \theta_3^{1(100)}]$ (см. рис. 4.5). Её длина пробега в нанопроводах из кристаллов CaF_2 и SrF_2 в 1.8 и 1.9 раза больше, чем для продольных фононов и в 1.7 и 1.8 раза больше, чем в модели изотропной среды.

В кристаллах второго типа преобладающий вклад в теплопроводность дает медленная поперечная мода: в направлении фокусировки [111] её вклад превышает 60% для нанопроводов из кристаллов CaF_2 и SrF_2 , а для PbS уменьшается до 59% (см. таблицу 4.6). В направлении [110] доминирующий вклад в теплопроводность вносит быстрая поперечная

Таблица 4.6

Вклад колебательных мод в теплопроводность стержней из SrF_2 , CaF_2 и PbS с квадратным сечением длиной $L/D=100$ в симметричных направлениях (%)

| Направление градиента температур | SrF_2 | | | CaF_2 | | | PbS | | |
|-------------------------------------|----------------|-------|-------|----------------|-------|-------|--------------|-------|-------|
| | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 | L | t_1 | t_2 |
| [100] | 17 | 34 | 49 | 20 | 31 | 49 | 24 | 30 | 46 |
| [110] | 10 | 58 | 32 | 10 | 54 | 36 | 11 | 49 | 40 |
| [111] | 9 | 30 | 61 | 8 | 30 | 62 | 8 | 33 | 59 |

мода. Её вклад составляет 58% для нанопроводов из кристаллов SrF_2 и уменьшается до 49% для нанопроводов из PbS (см. таблицу 4.6). В нанопроводах из кристаллов второго типа продольные фононы фокусируются и дефокусируются в направлениях [100] и [111], соответственно. Их вклад в теплопроводность в направлениях [100] составляет от 17 до 24%, а в направлениях [111] уменьшается до 8-9% (см. таблицу 4.6).

Итак, установлена корреляция между угловыми зависимостями плотностей фононных состояний (ПФС) и длин свободного пробега квазипоперечных мод. Показано, что для всех нанопроводов области максимумов длин пробега и ПФС для быстрых и медленных поперечных мод в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ совпадают и обусловлены фокусировкой фононов.

4.4. ИЗМЕНЕНИЕ АНИЗОТРОПИИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПРИ ПЕРЕХОДЕ ОТ НАНОПРОВОДОВ К КВАДРАТНЫМ ПЛЕНКАМ С РАЗЛИЧНОЙ ОРИЕНТАЦИЕЙ ПЛОСКОСТЕЙ

В этом разделе проанализируем угловые зависимости теплопроводности $\kappa_{[l(\psi)]}^{(j)}(T)$ и средних длин пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{(j)}(\mu)$ в наноструктурах при вращении градиента температуры в плоскостях с различной ориентацией. При фиксированной температуре угловые зависимости теплопроводности и длин пробега фононов отличаются только постоянным множителем (см. 4.1). Поэтому ниже рассмотрим сначала изменение анизотропии средних длин свободного пробега фононов при переходе от нанопроводов с квадратным сечением к достаточно широким пленкам. Затем проанализируем изменение анизотропии длин пробега для различных ориентаций плоскостей пленок и сравним с результатами, следующими из модели изотропной среды. Определим ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальные или минимальные значения длин пробега фононов (и теплопроводностей).

Как видно из рисунков 4.6 - 4.8, угловые зависимости длин свободного пробега фононов в монокристаллических наноструктурах 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 $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{(j)}(\mu)$ для всех направлений теплового потока и рассмотренных ориентаций плоскостей пленок качественно подобны, отличаясь только большей или меньшей степенью анизотропии. Поэтому на рисунках 4.6 – 4.8 мы привели угловые зависимости $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{(j)}(\mu)$ только для двух кристаллов первого типа Ge и алмаза и одного из кристаллов второго типа – CaF_2 [27].

Рассмотрим анизотропию фононного транспорта в нанопроводах при вращении теплового потока в плоскостях $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ и сравним с результатами, полученными для пленок. Как уже отмечалось в предыдущем разделе, для кристаллов первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа $[001]$, и обеспечивается медленной поперечной модой (см. рис. 4.5 – 4.6). В направлениях $[110]$ и $[111]$ угловые зависимости теплопроводности и средних длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{(j)}(1)$ имеют локаль-

ные максимумы, которые обусловлены фокусировкой быстрой поперечной и продольной модами, соответственно (см. рис. 4.6 (б)). При вращении теплового потока в плоскости $\{100\}$ длины пробега фононов

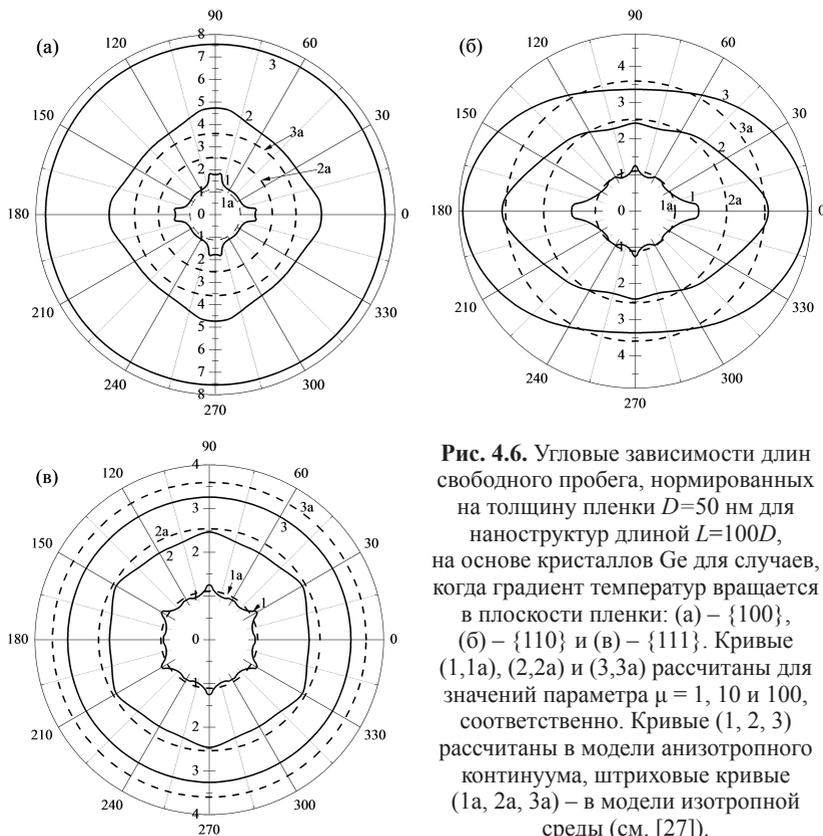


Рис. 4.6. Угловые зависимости длин свободного пробега, нормированных на толщину пленки $D=50$ нм для наноструктур длиной $L=100D$, на основе кристаллов Ge для случаев, когда градиент температур вращается в плоскости пленки: (а) – $\{100\}$, (б) – $\{110\}$ и (в) – $\{111\}$. Кривые (1, 1a), (2, 2a) и (3, 3a) рассчитаны для значений параметра $\mu = 1, 10$ и 100 , соответственно. Кривые (1, 2, 3) рассчитаны в модели анизотропного континуума, штриховые кривые (1a, 2a, 3a) – в модели изотропной среды (см. [27]).

в нанопроводах $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(l)$ из кристаллов первого типа для всех направлений оказываются выше, чем для изотропной среды $\tilde{\Lambda}_{iso}(l)$. Однако в плоскости $\{110\}$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(l)$ имеют значения большие, чем $\tilde{\Lambda}_{iso}(l)$ только для направлений, близких к $[100]$ и $[110]$. При вращении теплового потока в плоскости $\{111\}$ длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(l)$ в широком интервале углов ψ оказываются меньше, чем в

изотропной среде (см. рис. 4.6в, 4.7в), и только для направлений близких к $[110]$ они превышают значения для изотропных сред.

В противоположность этому, для кристаллов второго типа (CaF_2 , NaCl , YIG) максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа $[111]$ и обеспечивается медленной поперечной модой, которая фокусируется в этом направлении (см. рис. 4.5 и 4.6). Для направлений $[110]$ и $[100]$ угловые зависимости теплопроводности и длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{[j]}(1)$ имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой быстрой поперечной и продольной модами, соответственно. Для теплового потока в плоскости $\{100\}$ длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{100\}}(1)$ в нанопроводах из кристаллов второго типа оказываются меньше, чем в изотропных средах $\tilde{\Lambda}_{iso}(1)$, за исключением направлений близких к $[110]$ (см. рис. 4.6). Для плоскости $\{111\}$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{111\}}(1)$ в широком интервале углов ψ оказываются больше, чем в изотропных средах, за исключением направлений близких к $[110]$.

Как видно из рисунков 4.6 - 4.8, рост ширины пленок приводит к увеличению длин свободного пробега и к качественному изменению их угловых зависимостей $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{j\}}(\mu)$ 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. 4.6а, 4.6в, 4.7а, 4.8в). Причем, в кристаллах первого типа для пленок с ориентацией $\{100\}$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ оказываются больше, чем в изотропных средах, однако для ориентации $\{111\}$ ситуация обратная – для всех направлений длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ меньше, чем в изотропной среде. В пленках из кристаллов второго типа угловые зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{j\}}(\mu)$ качественно отличаются. Для них выполняются обратные неравенства: для ориентации $\{100\}$ при $\mu = 100$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ для всех углов ψ меньше, а величины $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ – больше, чем в изотропных средах. Для плоскости $\{110\}$ угловые зависимости $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ 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. 4.6б – 4.8б). Отношения длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu) / \tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{110\}}(\mu)$ в пленках 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 кристал-

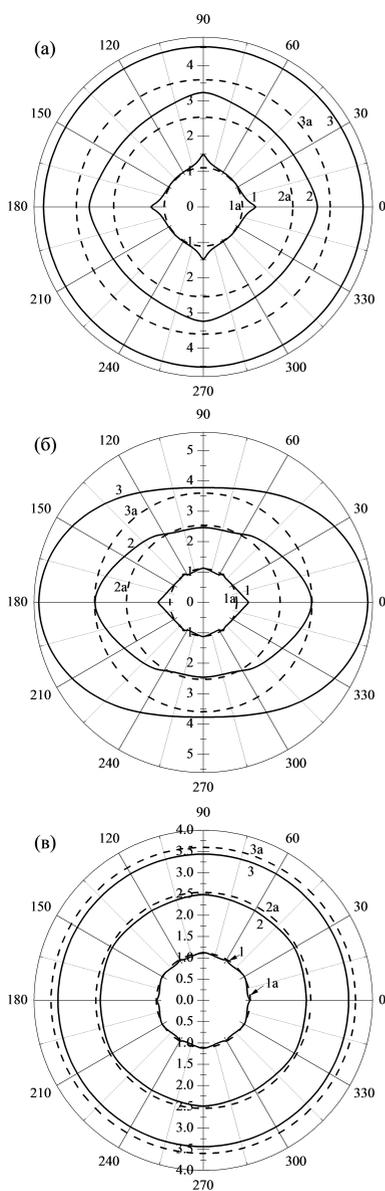


Рис. 4.7. То же, что и на рис. 4.6 для алмазных наноструктур [27]

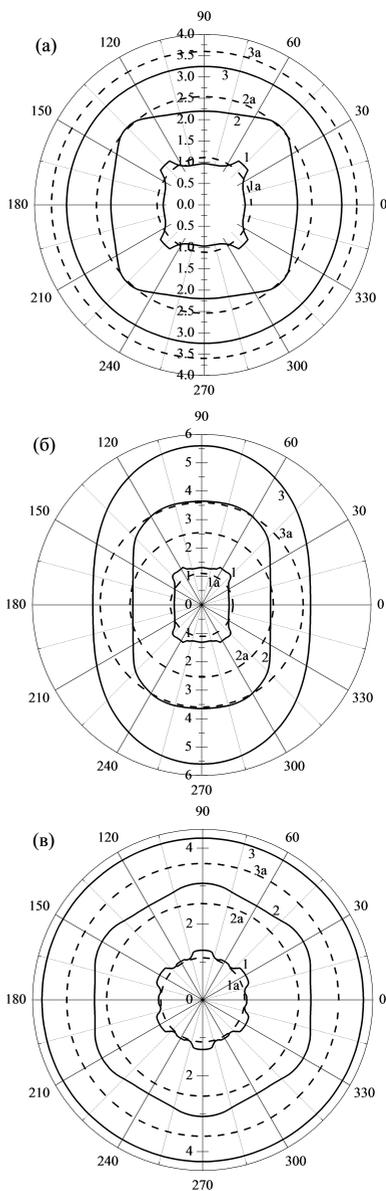


Рис. 4.8. То же, что и на рис. 4.6 для наноструктур, на основе кристаллов CaF_2 [27].

лах первого типа LiF, GaAs, Ge, Si YAG длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в плоскости $\{110\}$ оказываются меньше, чем в плоскости $\{100\}$ при всех углах ψ . Однако для алмазных пленок в направлениях близких к $[100]$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ оказываются больше, чем $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{100\}}(100)$, тогда как для направлений близких к $[110]$ ситуация обратная. Причем, длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ для алмазных пленок с ориентацией $\{J\} = \{110\}$ оказываются больше, чем в изотропных средах при всех углах ψ (см. рис. 4.7б). В противоположность этому, для кристаллов первого типа LiF, GaAs, Ge, Si в области углов $-(\pi/3) < \psi < (\pi/3)$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{110\}}(100) > \tilde{\Lambda}_{iso}(100)$, тогда как вне этого интервала $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{110\}}(100) < \tilde{\Lambda}_{iso}(100)$. 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. 4.6б). В противоположность этому для ориентации пленки $\{100\}$ длины пробега в кристаллах второго типа CaF₂, 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 CaF₂, NaCl, YIG составляют 0.69, 0.77 и 0.94, соответственно.

Итак, нами показано: во-первых, что в наноструктурах из кристаллов с положительной ($k-1 > 0$) и отрицательной ($k-1 < 0$) анизотропией упругих модулей второго порядка не только спектр и вектора поляризации [44], но и анизотропия длин свободного пробега фононов качественно отличаются. Во-вторых, угловые зависимости теплопроводности и длин свободного пробега фононов для кристаллов обоих типов качественно изменяется при переходе от нанопроводов к достаточно широким пленкам. В-третьих, максимальные значения теплопроводности пленок с параметрами $L=W=100D$ и $D=50$ нм из кристаллов первого типа LiF, GaAs, Ge, Si и YAG реализуются для пленок с ориентацией $\{100\}$, а минимальные - для пленок с ориентацией $\{111\}$. Максимальные значения теплопроводности алмазных пленок при $\mu = 100$ достигаются для ориентации плоскости $\{110\}$ в направлении $[100]$, а минимальные значения – для пленок с плоскостью $\{111\}$. Максимальные

значения теплопроводности в пленках с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50$ нм 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 $\{100\}$.

4.5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено влияние анизотропии упругой энергии на фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии. Проанализированы зависимости решеточной теплопроводности от геометрических параметров наноструктур при низких температурах, когда доминирует диффузное рассеяние фононов на границах. Основные результаты исследований влияния фокусировки фононов на фононный транспорт в монокристаллических пленках из кристаллов первого GaN , GaAs , Ge , MgO , Si , алмаз, YAG и второго типа NaCl , CaF_2 , SrF_2 , YIG могут быть сформулированы следующим образом:

1. Для изотропных сред длины пробега фононов разных поляризацій совпадают и равны средней длине свободного пробега. Они не зависят от упругих модулей, а определяются полностью геометрическими параметрами, поэтому являются удобной системой сравнения для упруго анизотропных наноструктур.

2. В упруго анизотропных наноструктурах длины пробега фононов разных поляризацій различны и существенно зависят не только от их геометрических параметров, но и от направлений теплового потока и ориентации боковых граней наноструктур. 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. 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.

4. Анизотропия теплопроводности и длин свободного пробега фононов для наноструктур из кристаллов первого и второго типа качественно отличаются и в нанопленках, и в нанопроводах. Для кристаллов одного типа угловые зависимости длин пробега для всех направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок качественно подобны, отличаясь только большей или меньшей степенью анизотропии.

5. Установлена корреляция между угловыми зависимостями плотностей фононных состояний и длин свободного пробега квазипоперечных мод. Показано, что для всех нанопроводов области максимумов длин пробега и ПФС для быстрых и медленных поперечных мод в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ совпадают и обусловлены фокусировкой фононов.

6. Анализ зависимостей длин свободного пробега фононов в пленках с ориентацией $\{100\}$ и направлением градиента температуры $[L] = [100]$ от геометрических параметров показал, что их значения для пленок из кристаллов первого типа оказываются больше, а из кристаллов второго типа – меньше, чем в изотропных средах. В пленках с ориентациями плоскостей $\{J\} = \{111\}$ и направлением градиента температуры $[11\bar{2}]$ последовательность зависимостей длин пробега в материалах с различным типом анизотропии упругой энергии становится обратной по отношению к пленкам с ориентацией $\{100\}$. Их величины в пленках из кристаллов второго типа оказываются больше, а в кристаллах первого типа – меньше, чем рассчитанные в изотропных средах.

7. Определены ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов полупроводниковых микросхем. Максимум теплопроводности в плоскости квадратных пленок на основе кристаллов первого типа GaN, GaAs, MgO, LiF, GaAs, Ge, Si и YAG достигается для ориентации плоскостей типа $\{100\}$, а минимум – для ориентаций $\{111\}$. В квадратных пленках на основе кристаллов второго типа CaF₂, NaCl, YIG минимум теплопроводности достигается для ориентации плоскостей типа $\{111\}$, а максимум – для ориентации плоскости $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$.

Глава 5. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФОНОНОВ И ФОНОННЫЙ ТРАНСПОРТ В ПЛЕНКАХ С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ АНИЗОТРОПИИ УПРУГОЙ ЭНЕРГИИ

В этом разделе изучим влияние фокусировки на распространение фононов и фононный транспорт в монокристаллических пленках с различным типом анизотропии упругой энергии. Для этого рассчитаем угловые зависимости теплопроводности и длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}$ при вращении градиента температуры в плоскости пленок. Рассмотрим сначала влияние фокусировки фононов на анизотропию длин пробега фононов в квадратных пленках ($L=W$) с различными ориентациями плоскостей. Затем проанализируем физические причины, приводящие к изменению анизотропии длин пробега фононов при переходе к длинным пленкам $L \gg W$. Сравним угловые зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}$ в упруго анизотропных наноструктурах с результатами, следующими из модели изотропной среды. Как уже отмечалось, в изотропных средах длины пробега фононов разных поляризаций совпадают и определяются полностью геометрическими параметрами. Они являются удобной системой сравнения для длин пробега в упруго анизотропных наноструктурах при изменении ориентации плоскости пленки или направления потока тепла. Изложение этой главы основано на работах [70, 109].

5.1. АНИЗОТРОПИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КВАДРАТНЫХ ПЛЕНОК С РАЗЛИЧНОЙ ОРИЕНТАЦИЕЙ ПЛОСКОСТЕЙ

Рассмотрим особенности фононного транспорта в квадратных пленках с разным типом анизотропии упругой энергии на основе кристаллов GaAs и CaF₂. При сравнении угловых зависимостей длин свободного пробега фононов в этих пленках с различными ориентациями плоскостей обращают на себя внимание следующие особенности (см. рис. 5.1). Во-первых, теплопроводность и средние длины пробега фононов в квадратных пленках ($L=W$) с ориентациями плоскостей $\{100\}$ и $\{111\}$ являются изотропными для кристаллов обоих типов, а для пле-

нок на основе кристаллов первого и второго типов с ориентацией $\{110\}$ они имеют эллипсоидальный вид с длинными осями вдоль направлений $[100]$ и $[110]$, соответственно. Во-вторых, в пленках с ориентациями плоскостей $\{J\} = \{001\}$ средние длины свободного пробега для всех кристаллов первого типа оказываются больше, а в пленках из кристаллов второго типа они меньше, чем в модели изотропной среды (см. таблицу 5.1). Так, например, в пленках GaAs с $\{J\} = \{100\}$ средние длины пробега оказываются в 1.95 раза больше, а для пленок CaF₂ на 10% меньше, чем в модели изотропной среды. В-третьих, для пленок с ориентациями плоскостей $\{111\}$ складывается обратная ситуация: средние длины пробега в пленках из кристаллов первого типа оказываются меньше, а в пленках из кристаллов второго типа – больше, чем в модели изотропной среды (см. таблицу 5.1). Так, например, в пленках GaAs с $\{J\} = \{111\}$ средние длины пробега оказываются на 12% меньше, а в пленках CaF₂ на 19% больше, чем в модели изотропной среды. Для остальных материалов смотрите таблицу 5.1. Далее мы проанализируем физические причины, которые обуславливают зависимости тепло-

Таблица 5.1

Отношения длин свободного пробега для квадратных пленок с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50$ нм в симметричных направлениях

| Соединение | $\Lambda_{[J(\psi)]}^{\{1100\}} \cdot \Lambda_{[J(\psi)]}^{r\{100\}} : \Lambda_{[J(\psi)]}^{L\{100\}} \cdot \Lambda_{iso}$ | $\Lambda_{[J(\psi)]}^{\{1111\}} \cdot \Lambda_{[J(\psi)]}^{r\{111\}} \cdot \Lambda_{[J(\psi)]}^{L\{111\}} \cdot \Lambda_{iso}$ | $\Lambda_{[100]}^{\{100\}} \cdot \Lambda_{[100]}^{\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{\{110\}} \cdot \Lambda_{[110]}^{\{111\}} \cdot \Lambda_{iso}$ |
|------------------|--|--|---|
| GaAs | 2.50:1.87:0.73:1 | 1.12:0.62:1.19:1 | 1.95:1.27:0.91:0.88:1 |
| Ge | 3.00:1.85:0.74:1 | 1.13:0.64:1.18:1 | 2.10:1.33:0.93:0.91:1 |
| InSb | 2.23:1.89:0.73:1 | 1.10:0.61:1.19:1 | 1.86:1.22:0.88:0.86:1 |
| LiF | 3.36:1.84:0.76:1 | 1.13:0.65:1.18:1 | 2.23:1.38:0.95:0.91:1 |
| MgO | 3.40:1.81:0.77:1 | 1.12:0.67:1.16:1 | 2.24:1.46:0.97:0.92:1 |
| Si | 3.46:1.84:0.77:1 | 1.1:0.65:1.2:1 | 2.29:1.40:0.94:0.91:1 |
| алмаз | 1.48:1.23:0.85:1 | 1.07:0.79:1.10:1 | 1.26:1.51:1.05:0.96:1 |
| CaF ₂ | 1.12:0.62:1.37:1 | 1.69:0.87:0.81:1 | 0.90:1.07:1.55:1.19:1 |
| NaCl | 1.20:0.60:1.57:1 | 1.59:0.88:0.74:1 | 0.96:1.06:1.38:1.12:1 |

проводности и длин пробега фононов от ориентации плоскостей пленок. Как уже отмечалось, в теории Казимира – МакКарди [13,19] предполагается, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по

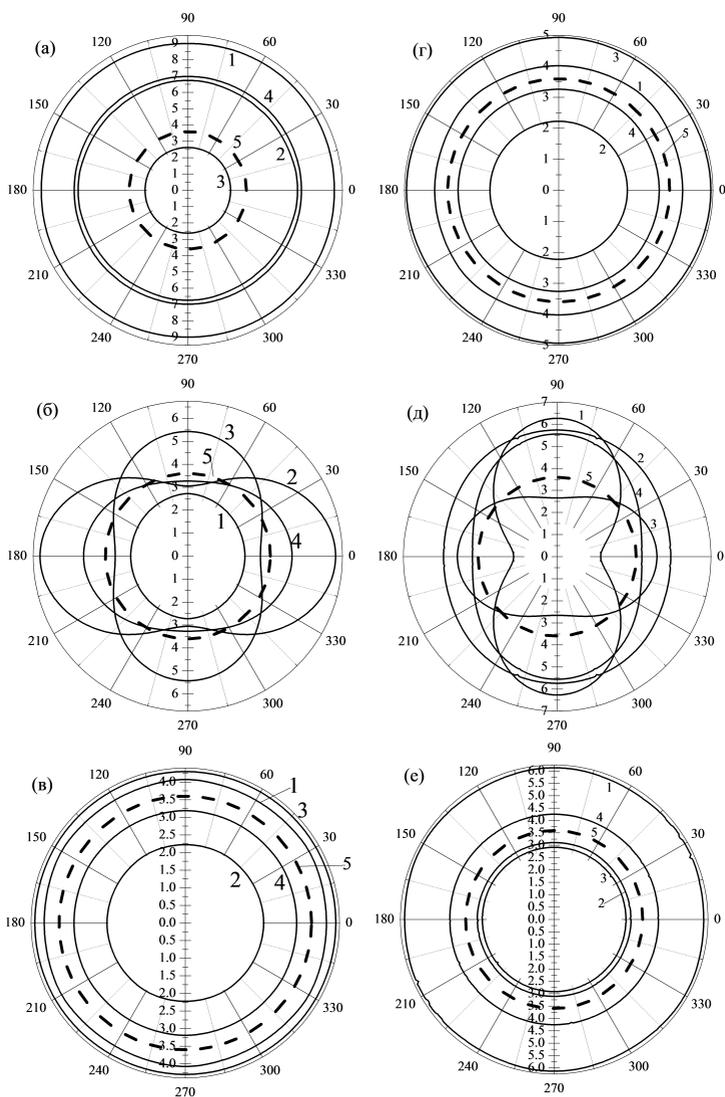


Рис. 5.1. Угловые зависимости приведенных длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda,j} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda,j} / D$ и $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{i,j} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{i,j} / D$, для квадратных пленок с параметрами $L=W=100D$ и $D=50$ нм и ориентациями плоскостей $\{100\}$ (а,г), $\{110\}$ (б,д) и $\{111\}$ (в,е), из кристаллов GaAs (а,б,в) и CaF₂ (г,д,е). Кривые 1 – быстрая поперечная мода, 2 – медленная поперечная мода, 3 – продольная мода, 4 – средняя длина свободного пробега, 5 – длина свободного пробега, рассчитанная в модели изотропной среды

направлению внутрь образца. Поэтому в каждой точке поверхности независимо от её ориентации фононы всех поляризации рассеиваются диффузно. Поэтому, казалось бы, теплопроводность пленок не должна зависеть от ориентации плоскостей. Однако мы покажем, что эти зависимости обусловлены влиянием упругой анизотропии на распространение акустических мод в пленках, имеющих различную ориентацию.

При анализе влияния фокусировки на распространение фононов в пленках нам необходимо проанализировать распределение длин пробега фононов по углам $\Phi(\theta, \varphi)$ в плоскостях пленок, имеющих различную ориентацию, а также их распределение по углам $\Theta(\theta, \varphi)$ в поперечных сечениях, включающих направление теплового потока. Для этого перейдем в систему координат, связанную с пленкой. Ось Z направим перпендикулярно плоскости пленки. В этом случае угол Φ будет определять распределение теплового потока в плоскости пленки, а угол Θ – в поперечном сечении, включающем направление теплового потока. В пленках, имеющих ориентацию $\{100\}$ угол $\Phi = \varphi$ и $\Theta = \theta$. В новой системе координат распределение длин пробега фононов в пленках по углам Θ и Φ может быть определено следующим образом [70]:

$$\Lambda_{[l]}^{\lambda \{J\}}(\Theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\Phi \Lambda_{[l(\varphi)]}^{\lambda \{J\}}(\Theta, \Phi), \quad (5.1)$$

$$\Lambda_{[l]}^{\lambda \{J\}}(\Phi) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \Theta) \Lambda_{[l(\varphi)]}^{\lambda \{J\}}(\Theta, \Phi).$$

Определим актуальный интервал углов, дающий основной вклад при усреднении длин пробега по углам Φ в плоскостях пленок с различными ориентациями. Для этого в формулах (5.1) проведем усреднение по поперечному сечению пленки и построим зависимости длин пробега $\Lambda_{[l(\varphi)]}^{\lambda \{J\}}(\Phi)$ от угла Φ . Анализ показал, что для квадратных пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ этот интервал углов составляет приблизительно $\Delta\Phi \cong \pi/2$, а для некоторых мод несколько превышает это значение.

Для пленок с плоскостью $\{100\}$ медленные квазипоперечные моды t_2 фокусируются и дефокусируются в направлениях $[100]$ и $[110]$. Для продольных фононов в этих направлениях происходит дефокусировка и локальный максимум фокусировки, соответственно. Угол между этими направлениями составляет $\Delta\varphi = \pi/4$. В пленках с плоскостью $\{111\}$

угол между направлениями фокусировки $[110]$ и дефокусировки $[11\bar{2}]$ для моды t_2 и продольных фононов составляет $\Delta\varphi = \pi/6$. Из этого следует, что для произвольного направления потока тепла в квадратных пленках с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ из кристаллов обоих типов область усреднения захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому не удивительно, что после усреднения по углам Φ для квадратных пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ длины пробега становятся изотропными (см. рис. 5.1). Отношения длин свободного пробега фононов в пленках с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ из кристаллов первого типа изменяются от 1.3 для алмаза до 2.5 для Si, тогда как в кристаллах второго типа эти отношения меньше единицы (см. таблицу 5.2). Итак, анизотропия теплопроводности и длин свободного пробега фононов в квадратных пленках с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ в режиме граничного рассеяния определяется главным образом ориентацией плоскости пленки.

Таблица 5.2

Отношения длин свободного пробега в симметричных направлениях для квадратных пленок с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50$ нм.

| Соединение | $\Lambda_{[110]}^{L\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{L\{111\}} :$ | $\Lambda_{[100]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{L\{111\}} :$ | $\Lambda_{[100]}^{2\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{2\{110\}} :$ | $\Lambda_{[J(\varphi)]}^{\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{\{110\}} :$ |
|------------------|---|---|---|--|
| | $\Lambda_{[100]}^{L\{110\}} : \Lambda_{[100]}^{L\{100\}}$ | $\Lambda_{[110]}^{L\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{L\{100\}}$ | $\Lambda_{[110]}^{2\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{2\{111\}}$ | $\Lambda_{[110]}^{\{110\}} : \Lambda_{[J(\varphi)]}^{\{111\}}$ |
| GaN | 2.5:1.78:1.3:1 | 2.6:1.5:1.05:1 | 2.89:2.37:1.24:1 | 1.97:1.35:1.04:1 |
| GaAs | 2.06:1.63:1.21:1 | 3.64:1.62:1.09:1 | 3.01:2.90:1.37:1 | 2.20:1.44:1.03:1 |
| Ge | 1.97:1.60:1.19:1 | 4.29:1.62:1.10:1 | 2.90:3.06:1.41:1 | 2.33:1.47:1.04:1 |
| InSb | 2.06:1.62:1.20:1 | 3.20:1.59:1.09:1 | 3.09:2.75:1.33:1 | 2.17:1.42:1.02:1 |
| LiF | 1.88:1.56:1.17:1 | 4.85:1.65:1.11:1 | 2.82:3.21:1.43:1 | 2.44:1.51:1.04:1 |
| MgO | 1.76:1.50:1.15:1 | 4.78:1.59:1.10:1 | 2.70:3.40:1.46:1 | 2.43:1.58:1.05:1 |
| Si | 1.79:1.51:1.15:1 | 4.93:1.63:1.10:1 | 2.83:3.27:1.43:1 | 2.52:1.54:1.03:1 |
| алмаз | 1.40:1.29:1.08:1 | 1.90:1.37:1.07:1 | 1.57:3.11:1.51:1 | 1.32:1.58:1.10:1 |
| CaF ₂ | 0.54:0.59:0.92:1 | 2.03:3.10:3.16:1 | 0.72:1.66:1.85:1 | 0.77:0.91:1.31:1 |
| NaCl | 0.42:0.47:0.91:1 | 2.21:2.96:2.63:1 | 1.69:1.57:1.79:1 | 0.86:0.95:1.23:1 |

Рассмотрим физические причины, приводящие к эллипсоидальному виду зависимости длин пробега фононов (теплопроводности) в квадратных пленках с ориентацией плоскости $J = \{110\}$. Как видно из рисунка 5.1, эта зависимость в пленках из кристаллов первого типа обу-

словлена медленной поперечной модой t_2 , а в пленках из кристаллов второго типа - быстрой поперечной модой t_1 . В пленках с ориентацией $J = \{110\}$ эти моды и фокусируются и дефокусируются в направлениях $[100]$ и $[110]$. Угол между этими направлениями составляет $\Delta\Phi = 90^\circ$. Этот угол оказывается слишком велик, чтобы при усреднении по углу Φ в плоскости пленки полностью размыть эффект фокусировки, в отличие от пленок с плоскостями $\{100\}$ и $\{111\}$. Для произвольного направления градиента температур при усреднении по углам в плоскости пленки $\{110\}$ оба направления не могут быть одновременно охвачены, и угловые зависимости длин пробега фононов остаются анизотропными. Поэтому анизотропия вкладов фононных мод в теплопроводность не усредняется, и теплопроводность в плоскости пленки $J = \{110\}$ принимает эллипсоидальный вид (см. рис. 5.1). В кристаллах первого типа длинная ось эллипсоида направлена вдоль $[100]$, в котором фокусируется мода t_2 . В этом направлении её длина пробега в кристаллах GaAs превосходит Λ_{iso} более, чем в 1.8 раза (см. таблицу 5.1). Направление дефокусировки $[110]$ соответствует короткой оси эллипсоида, в котором длина пробега оказывается на 17% меньше, чем Λ_{iso} . Для продольных фононов имеем обратную ситуацию: направления фокусировки и дефокусировки по сравнению с медленной поперечной модой t_2 меняются местами. Угол между этими направлениями составляет $\Delta\Phi = 90^\circ$. Угловая зависимость длин пробега имеет также эллипсоидальный вид, но длинная ось эллипсоида имеет направление $[110]$, а короткая ось - $[100]$. Длины пробега продольных фононов в пленках Ge и Si в направлении $[110]$ оказываются в 1.5 и 1.4 раза больше, а в направлении $[100]$ - соответственно на 13% и 12% меньше, чем в модели изотропной среды (см. таблицу 5.2). Однако ввиду малой по сравнению с поперечными фононами теплоемкости (см. таблицу 5.3) их вклад недостаточен, чтобы кардинально изменить вид полной теплопроводности для рассматриваемых материалов (см. рис. 5.1). Итак, в пленках с ориентацией $\{110\}$ из кристаллов первого типа максимальные значения теплопроводности достигаются в направлениях $[001]$, а минимальные - в направлениях $[110]$.

Из рисунка 5.1 видно, что в пленках из кристаллов второго типа эллипсоидальный вид зависимости теплопроводности обусловлен быстрой поперечной модой t_1 . Она фокусируется и дефокусируется в направлениях $[110]$ и $[001]$, соответственно. Поэтому длинная ось эллип-

соида в этих кристаллах направлена вдоль $[110]$, а короткая – вдоль направления дефокусировки $[100]$. Для продольных фононов длины пробега в пленках из кристаллов второго типа имеют максимальные значения в направлении $[001]$, а минимальные - в направлениях $[110]$.

Таблица 5.3

Вклад колебательных мод в теплопроводность квадратных пленок с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50$ нм на основе кристаллов первой и второй групп для различных направлений теплового потока (%)

| | $\{J\}$ [L] | $\{100\}$ | $\{110\}$ [100] | $\{110\}$ [110] | $\{111\}$ |
|------------------|----------------|-----------|--------------------|--------------------|-----------|
| GaAs | L | 5 | 10 | 23 | 19 |
| | t_1 | 47 | 20 | 30 | 46 |
| | t_2 | 48 | 70 | 47 | 35 |
| Ge | L | 5 | 10 | 24 | 20 |
| | t_1 | 53 | 19 | 30 | 46 |
| | t_2 | 42 | 71 | 46 | 34 |
| InSb | L | 5 | 9 | 22 | 17 |
| | t_1 | 43 | 20 | 31 | 46 |
| | t_2 | 52 | 71 | 47 | 37 |
| GaN | L | 5 | 10 | 25 | 18 |
| | t_1 | 37 | 21 | 28 | 42 |
| | t_2 | 58 | 69 | 47 | 40 |
| LiF | L | 5 | 10 | 24 | 20 |
| | t_1 | 56 | 19 | 30 | 46 |
| | t_2 | 39 | 71 | 46 | 34 |
| MgO | L | 6 | 10 | 23 | 20 |
| | t_1 | 57 | 18 | 30 | 46 |
| | t_2 | 37 | 72 | 47 | 34 |
| Si | L | 5 | 9 | 22 | 19 |
| | t_1 | 57 | 19 | 31 | 47 |
| | t_2 | 38 | 72 | 47 | 34 |
| алмаз | L | 12 | 11 | 21 | 22 |
| | t_1 | 46 | 20 | 31 | 43 |
| | t_2 | 42 | 69 | 48 | 35 |
| CaF ₂ | L | 18 | 14 | 6 | 8 |
| | t_1 | 48 | 20 | 44 | 56 |
| | t_2 | 34 | 66 | 50 | 36 |
| NaCl | L | 24 | 19 | 7 | 9 |
| | t_1 | 46 | 19 | 38 | 53 |
| | t_2 | 30 | 62 | 55 | 38 |

Для пленок CaF₂ их отношение составляет 1.7. Однако ввиду малых значений теплоемкости по сравнению с поперечными фононами

(см. таблицу 5.3) их вклад недостаточен, чтобы изменить вид полной теплопроводности для рассматриваемых материалов (см. рис. 5.1). В связи с этим в пленках из кристаллов второго типа с ориентацией $J = \{110\}$ максимальные значения теплопроводности достигаются в направлениях $[110]$, а минимальные - в направлениях $[100]$. Для пленок CaF_2 их отношение составляет 1.46. (см. таблицу 5.2). Итак, основной вклад в теплопроводность пленок из кристаллов первого типа GaAs, InSb и GaN с ориентаций $\{100\}$ вносит медленная поперечная мода, для кристаллов Ge, LiF, MgO, Si и алмаз - быстрая поперечная мода, тогда как в пленках из кристаллов обоих типов с ориентацией $\{111\}$ - быстрая поперечная мода (см. таблицу 5.3).

5.2. ОСОБЕННОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В ДЛИННЫХ ПЛЕНКАХ С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ АНИЗОТРОПИИ УПРУГОЙ ЭНЕРГИИ

Анализ, проведенный с использованием формул (5.1), показал, что с увеличением длины пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ интервалы углов, дающих при усреднении длин пробега основной вклад, значительно сужаются. Поэтому при переходе к длинным пленкам $L \gg W$ усреднение по углам F в плоскостях этих пленок оказывается уже недостаточным, чтобы полностью размыть эффект фокусировки фононов. В результате длины пробега в пленках из кристаллов обоих типов с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ становятся анизотропными (см. рис. 5.2). Как видно из рисунка 5.2, основной вклад в анизотропию теплопроводности и средних длин пробега фононов в пленках из кристаллов первого типа вносит медленная поперечная мода, которая фокусируется в направлениях типа $[100]$.

Однако в этих направлениях длины пробега $\Lambda_{[100]}^{t2\{100\}}$ для пленок с достаточно большими параметрами анизотропии (GaAs, GaN, LiF и Ge) имеют локальные минимумы: для пленок GaAs, например, её величина оказывается на 18% меньше, чем при углах $\psi = n\pi/2 \pm \theta_3$ (см. рис. 5.2а). В направлениях $[100]$ длина пробега медленной моды $\Lambda_{[100]}^{t2\{100\}}$ в пленках GaAs, оказывается на 53% больше, чем в направлениях $[110]$. Анизотропия теплопроводности и средних длин пробега в пленках GaAs с $L \gg W$ за счет вклада быстрой поперечной моды оказывается

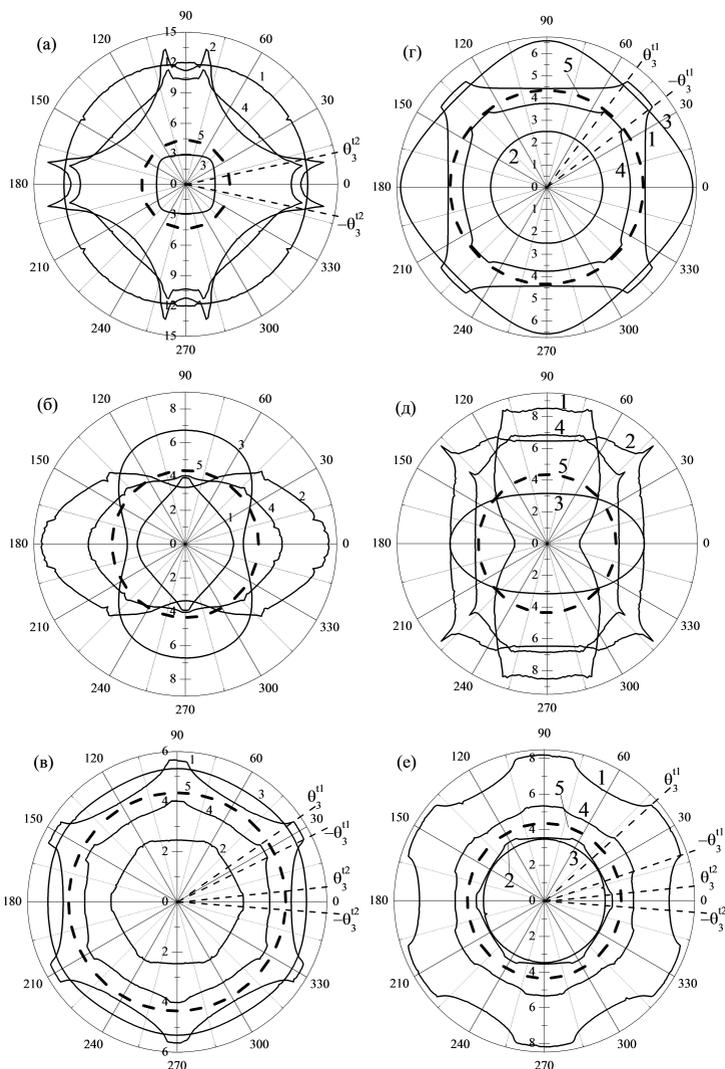


Рис. 5.2. Угловые зависимости приведенных длин свободного пробега фононов, $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda, j} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda, j} / D$ и $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda, j} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda, j} / D$ для пленок с параметрами $L=2000W$, $W=100D$ и $D=50$ нм и ориентациями плоскостей {100} (а,г), {110} (б,д) и {111} (в,е) на основе кристаллов GaAs (а,б,в) и CaF₂ (г,д,е). Кривые 1 – быстрая поперечная мода, 2 – медленная поперечная мода, 3 – продольная мода, 4 – средняя длина свободного пробега, 5 – длина свободного пробега в модели изотропной среды

заметно меньше: отношение $\Lambda_{[100]}^{(100)} : \Lambda_{[110]}^{(100)} = 1.2$. В длинных пленках GaAs с ориентацией $\{100\}$ средние длины пробега фононов оказываются больше, а для ориентации $\{111\}$ – меньше, чем в модели изотропной среды. Следует отметить, что области максимумов длин пробега фононов для пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ ограничены углами, определяющими области фокусировки фононов $\pm \theta_3^{I1}$ и $\pm \theta_3^{I2}$. Основной вклад в анизотропию теплопроводности при $L \gg W$ в пленках с ориентацией $\{100\}$ из кристаллов второго типа вносит быстрая поперечная мода, которая фокусируется в направлениях типа $[110]$ (см. рис. 5.2). Так, например, для пленок CaF_2 длина пробега $\Lambda_{[L]}^{I(100)}$ в направлении $[110]$ оказывается больше на 35%, чем в направлении $[001]$. Однако для полной теплопроводности пленки CaF_2 с ориентацией $\{100\}$ анизотропия уменьшается до 13%.

Для пленок из кристаллов обоих типов с ориентацией $\{111\}$ анизотропия теплопроводности обусловлена быстрой поперечной модой, которая фокусируется в направлениях типа $[110]$ и обеспечивает максимум средней длины пробега в этом направлении (см. рис. 5.2). Её длина пробега в длинных пленках GaAs оказывается на 24%, а в пленках CaF_2 на 16% больше, чем в направлениях типа $[11\bar{2}]$. Вклад медленной поперечной моды в теплопроводность мал, и в пленках из кристаллов обоих типов длина пробега для неё оказывается меньше, чем в модели изотропной среды. Сравним угловые зависимости длин пробега в упруго анизотропных пленках при $L \gg W$ с моделью изотропной среды. Как видно из рисунка 5.2, мы получаем те же результаты, что и для квадратных пленок. Средние длины пробега в пленках с ориентациями $\{100\}$ из кристаллов первого типа оказываются больше, а в пленках из кристаллов второго типа – меньше, чем в модели изотропной среды. Для GaAs – $\Lambda_{[100]}^{(100)} : \Lambda_{[110]}^{(100)} : \Lambda_{iso} = 2.39:1.98:1$, а для CaF_2 – $\Lambda_{[100]}^{(100)} : \Lambda_{[110]}^{(100)} : \Lambda_{iso} \cong 0.87:0.98:1$. Для пленок с ориентацией $\{111\}$ – ситуация обратная: средние длины пробега в пленках из кристаллов первого типа оказываются меньше, а в пленках из кристаллов второго типа – больше, чем в модели изотропной среды: для GaAs – $\Lambda_{[110]}^{(111)} : \Lambda_{[11\bar{2}]}^{(111)} : \Lambda_{iso} = 0.92:0.85:1$, а для CaF_2 – $\Lambda_{[110]}^{(111)} : \Lambda_{[11\bar{2}]}^{(111)} : \Lambda_{iso} = 1.23:1.16:1$. Итак, основной вклад в анизотропию теплопроводности в длинных пленках из кристаллов первого типа с ориентациями $\{100\}$ вносит медленная поперечная мода, тогда как в пленках с ориентациями $\{111\}$ – быстрая поперечная мода.

В пленках из кристаллов второго типа с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ анизотропия теплопроводности обусловлена, главным образом,

быстрой поперечной модой. При переходе к длинным пленкам с ориентацией $J = \{110\}$ эллипсоидальный вид угловых зависимостей и характерные особенности средних длин пробега фононов различных поляризаций сохраняются (см. рис. 5.2). В пленках из кристаллов первого типа средняя длина пробега фононов имеет максимум в направлении фокусировки медленной поперечной моды $[100]$, а минимум - вдоль направления её дефокусировки $[110]$. Однако в пленках из кристаллов второго типа длинная ось эллипсоида направлена вдоль направления фокусировки быстрой поперечной моды $[110]$, а короткая – вдоль направления её дефокусировки $[100]$. Дополнительные особенности в виде локальных максимумов на зависимости средней длины пробега в пленках CaF_2 обусловлены фокусировкой поперечных мод (см. рис. 5.2).

5.3. ВЛИЯНИЕ ФОКУСИРОВКИ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФОНОННЫХ МОД В КВАДРАТНЫХ ПЛЕНКАХ С ОРИЕНТАЦИЯМИ ПЛОСКОСТЕЙ $\{100\}$ И $\{111\}$

Проанализируем влияние фокусировки на распространение фононных мод в квадратных пленках ($L=W$) и покажем, что теплопроводность (и средние длины пробега) в пленках с ориентацией $\{100\}$ из кристаллов первого типа имеют большие значения, а из кристаллов второго типа меньшие, чем для пленок с ориентацией $\{111\}$. Хорошо известно, что основной вклад в теплосопrotивление вносит рассеяние фононов на плоскостях пленок, а преобладающий вклад в теплопроводность вносят фононы, распространяющиеся почти параллельно плоскости пленки (см., например, [24,25,31,32]). Поэтому для наших целей необходимо проанализировать распределение фононного потока по поперечному сечению пленки и влияние на него фокусировки фононов. Для этого усредним длины пробега по углам Φ в плоскостях пленок, согласно формулам (5.1), и построим их зависимости от угла Θ в поперечном сечении пленки, которое включает направление теплового потока (см. рис 5.3).

Как видно из рисунка 5.3, для ориентации $\{100\}$ в пленках из кристаллов первого типа фононы медленной моды фокусируются и дефокусируются в направлениях типа $[100]$ и $[110]$, соответственно. В пленках из кристаллов второго типа направления фокусировки и дефокуси-

ровки для этой плоскости меняются местами (см. рис. 5.3). В пленках с ориентацией $\{110\}$ из кристаллов первого типа медленные и быстрые поперечные моды фокусируются в направлениях типа $[100]$ и $[110]$,

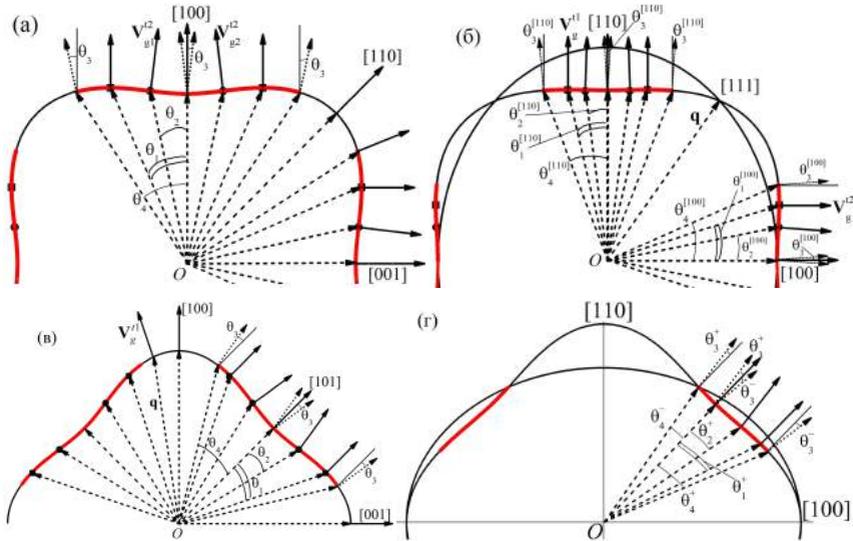


Рис. 5.3. Схема, иллюстрирующая фокусировку медленных и быстрых поперечных мод в кристаллах GaAs (а), (б) и CaF₂ (в), (г) для сечений изонергетической поверхности плоскостью XZ (а), (в) для моды t_2 и диагональной плоскостью для моды t_1 и t_2 (б), (г). Стрелками изображены волновые вектора внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её

соответственно. В пленках с ориентацией $\{110\}$ из кристаллов второго типа быстрая мода фокусируется под углом $\theta \approx n\pi/2 + \pi/4$ (n – целое число). Как видно из рисунка 5.4, для поперечных фононов в пленках из кристаллов первого типа с ориентацией $\{100\}$ преобладает эффект фокусировки, и усредненные по углу Φ длины пробега $\Lambda_{[001]}^{t1\{100\}}(\Theta)$ и $\Lambda_{[001]}^{t2\{100\}}(\Theta)$ при всех углах Θ оказываются больше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$ (см. рис. 5.4а). Тогда как для продольных фононов – наоборот: их длины пробега при всех углах оказываются меньше, чем Λ_{iso} . Обратная ситуация складывается для пленок из кристаллов второго типа. Для поперечных фононов в пленках с ориентацией $\{100\}$ преобладает эффект дефокусировки: усредненные по углу Φ длины пробега $\Lambda_{[001]}^{t1\{100\}}(\Theta)$ и $\Lambda_{[001]}^{t2\{100\}}(\Theta)$ при

всех углах Θ оказываются меньше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$ (см. рис. 5.4б). Однако для продольных фононов длины пробега в пленках из кристаллов второго типа при всех углах оказываются больше, чем Λ_{iso} . Как уже ранее отмечалось, вклад продольных фононов в теплопроводность и средние длины пробега в пленках для рассматриваемых материалов мал по сравнению с вкладом поперечных фононов (см. таблицу 5.3). Итак, теплопроводность и средние длины пробега фононов в квадратных пленках с ориентацией $\{100\}$ из кристаллов первого типа имеют большие значения, чем для пленок из кристаллов второго типа, поскольку для первых преобладает эффект фокусировки, тогда как для вторых - эффект дефокусировки фононов.

Следует отметить, что распределение длин пробега по поперечному сечению пленки, приведенное на рисунках 5.4, построено в пространстве волновых векторов. В координатном пространстве (или пространстве групповых скоростей) боковые пики $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{l2\{100\}}(\Theta)$, соответствуют волновым векторам, близким к углам $\pm\theta_1^{l2}$ для медленной поперечной моды в пленках из кристаллов первого типа (см. раздел 1.5, таблицу 1.5). Из-за эффекта фокусировки фононы этой моды будут распространяться в направлении $[100]$ (см. рис. 5.3), их длина свободного пробега может быть ограничена длиной образца или объемными механизмами рассеяния. Таким образом, боковые максимумы перейдут в центральный пик, соответствующий направлению градиента температуры (см. рис. 5.3 и 5.4). Аналогичным образом можно интерпретировать боковые максимумы на кривой $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{l1\{110\}}(\Theta)$ для быстрой поперечной моды, которая фокусируется в направлении $[110]$ для волновых векторов в плоскости $\{110\}$. Из рисунка 5.3 следует, что основной вклад в длины пробега поперечных мод в координатном представлении будут вносить области углов, ограниченные значениями $\pi/2 \pm \theta_3^{l2}$ и $\pi/2 \pm \theta_3^{l1}$ для медленных и быстрых поперечных мод, соответственно. Таким образом, распределение длин пробега в пленках из кристаллов первого типа для этих мод в координатном пространстве будет иметь однопиковый вид (как и в изотропной среде) с характерными ширинами распределения $2\theta_3^{l1}$ и $2\theta_3^{l2}$, соответственно.

В квадратных пленках с ориентацией плоскости $\{111\}$ зависимости длин пробега $\Lambda_{[I(\psi)]}^{l\{111\}}(\Theta)$ для всех акустических мод качественно изменяются по сравнению с зависимостями для пленок с ориентацией $\{100\}$ (см. рис. 5.4). Центральный максимум сохраняется только для

модели изотропной среды $\Lambda_{iso}(\Theta)$, а для всех акустических мод длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[l]}^{\lambda\{111\}}(\Theta)$ в пленках из кристаллов обоих типов в окрестности направления теплового потока (оси пленки) имеют плавные минимумы (см. рис. 5.4). Это означает, что для всех мод в направлениях волновых векторов, близких к направлению теплового потока, преобладают

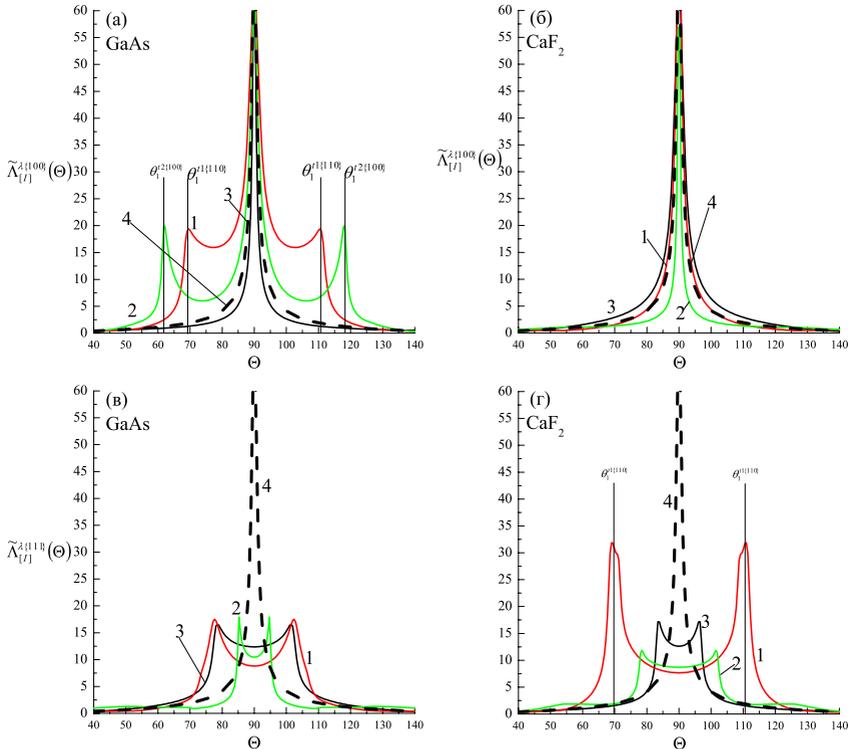


Рис. 5.4. Распределение длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l]}^{\lambda\{111\}}(\Theta)$ в поперечном сечении для пленок GaAs (а,в) и CaF₂ (б,г) с ориентациями {100} (а,б) и {111} (в,г) и параметрами $L=W=100D$, $D=50$ нм: кривые 1 – для моды t_1 , кривые 2 – для моды t_2 , кривые 3 – для продольных фононов, кривая 4 – для модели изотропной среды

эффекты дефокусировки, в отличие от пленок с ориентацией {100}. Причем, длины пробега $\Lambda_{[l]}^{\lambda\{111\}}(\Theta)$ почти во всем интервале углов Θ оказываются меньше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$, за исключением узких интервалов $84^\circ < \Theta < 87^\circ$ и $93^\circ < \Theta < 96^\circ$ для кристалла первого типа GaAs и $69^\circ < \Theta < 85^\circ$

и $95^\circ < \Theta < 111^\circ$ для кристалла второго типа CaF_2 , где они имеют локальные максимумы. Очевидно, что для квадратных пленок GaAs среднее значение $\Lambda_{[l(\psi)]}^{2\{111\}}$ будет значительно меньше, чем Λ_{iso} . Однако для быстрой поперечной и продольной мод интервалы углов Θ , где $\Lambda_{[l(\psi)]}^{2\{111\}}(\Theta) > \Lambda_{iso}(\Theta)$ значительно шире, поэтому средние значения для них будут превышать величины Λ_{iso} (см. рис. 5.1). Непосредственный расчет показывает, что средние длины пробега для пленок с ориентацией $\{111\}$ из кристаллов первого типа оказываются меньше, чем в модели изотропной среды главным образом за счет малых значений длин пробега для медленных поперечных мод. Для пленок GaAs они оказываются в 2.2 раза меньше, чем для ориентации $\{001\}$.

В квадратных пленках из кристаллов второго типа с ориентацией плоскости $\{111\}$ для медленных поперечных и продольных фононов также преобладают эффекты дефокусировки. Их длины свободного пробега в области центрального пика имеют плавный минимум, и только в узких интервалах углов, где они имеют локальные максимумы, их значения превышают $\Lambda_{iso}(\Theta)$ (см. рис. 5.4). Однако длина пробега быстрой поперечной моды $\Lambda_{[l(\psi)]}^{1\{111\}}(\Theta)$ имеет два боковых максимума, где величины $\Lambda_{[l(\psi)]}^{1\{111\}}(\Theta) > \Lambda_{iso}(\Theta)$. Поскольку эти максимумы значительно превосходят $\Lambda_{iso}(\Theta)$, то среднее значение для быстрой поперечной моды будет превышать величину Λ_{iso} (см. рис. 5.2е, кривая 1). В результате средние длины пробега для пленок с ориентацией $\{111\}$ из кристаллов второго типа оказываются выше, чем Λ_{iso} , а также значительней для пленок из кристаллов первого типа (см. рис. 5.2). Так, например, для пленок CaF_2 с ориентацией $\{111\}$ средние длины пробега оказываются в 1.3 раза больше, чем для пленок GaAs.

Из работ Фукса, Зондгеймера [30,31] известно, что при достаточно низких температурах теплосоппротивление пленок определяется главным образом рассеянием фононов на плоскостях пленок. В ряде работ для характеристики теплопроводности пленок при диффузном рассеянии фононов на границах пленок использовался термин «рассеивающая способность» плоскостей пленок с различной ориентацией (см., например, [28]). Следует отметить, что использование этого термина для характеристики влияния фокусировки фононов на теплопроводность пленок является физически некорректным. Дело в том, что в теории Казимира предполагается, что в каждой точке поверхности, независимо от её ориентации, фононы всех поляризаций рассеиваются

диффузно. При соударении с поверхностью они поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца. Таким образом, рассеивающая способность или интенсивность рассеяния пленок с различной ориентацией плоскостей одинакова. Влияние фокусировки фононов на теплопроводность пленок связано с отличием направления волнового вектора и направления распространения фононов и обусловлено упругой анизотропией кристаллов. Если направление теплового потока и ось пленки совпадает с направлением фокусировки одной из мод, то направления распространения фононов этой моды будут отклоняться от плоскостей пленки к её оси, и длина пробега этих фононов будет возрастать, как это имеет место для медленных поперечных фононов в пленках с ориентацией $\{100\}$ и направлением потока тепла $[100]$ (см. рис. 5.5). Причем, фононы моды t_2 с волновым вектором \mathbf{q}_1 и углом $\theta = \pm\theta_1$ будут распространяться в направлении $[100]$ (см. рис. 5.5). Фононы с волновым вектором \mathbf{q}_2 и углом $\theta = -\theta_2^{t_2}$ будут распространяться под углом $\theta = +\theta_3^{t_2}$ (см. рис. 5.3а и 5.5). Поскольку для GaAs углы $\theta_3^{t_2} = 12.0^\circ$, $\theta_2^{t_2} = 13.8^\circ$, то длина свободного пробега $\Lambda_{[100]}^{t_2\{100\}}(\theta_3^{t_2})$ будет меньше, чем в модели изотропной среды $\Lambda_{iso}(\theta_2)$ (см. рис. 5.5). При диффузном рассеянии на границах длина свободного пробега фонона с волновым вектором \mathbf{q} определяется расстоянием, пройденным фононом до столкновения с поверхностью образца. На рисунках 5.5 для каждого направления она определяется длиной вектора групповой скорости от точки испускания до столкновения с поверхностью. Для быстрой поперечной моды в плоскости грани куба спектр фононов изотропен, и эффект фокусировки отсутствует. Поэтому направление волнового вектора \mathbf{q}_2 совпадает с направлением групповой скорости $\mathbf{v}_g^{t_1}(\mathbf{q}_2)$, и, соответственно, длина пробега $\Lambda_{[100]}^{t_1\{100\}}(\theta_2) = \Lambda_{iso}(\theta_2)$ (см. рис. 5.5). Если направление теплового потока и ось пленки совпадает с направлением дефокусировки одной из мод, то направления распространения фононов этой моды будут отклоняться от оси пленки к её плоскостям, и длина пробега этих фононов будет уменьшаться. Это имеет место для продольных фононов с волновым вектором \mathbf{q}_1 , для которых угол распространения, определяемый направлением групповой скорости, становится больше, чем угол θ_1 . И, соответственно, длина пробега $\Lambda_{[100]}^{L\{100\}}(\theta_1)$ становится меньше, чем $\Lambda_{iso}(\theta_1)$ (см. рис. 5.5 а).

Итак, для направления потока тепла $[100]$ в пленке с ориентацией $\{100\}$ фононы медленной поперечной моды, имеющие волновые вектора в секторе $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$, будут отклоняться от плоскостей к оси плен-

ки, и их длина пробега может значительно превышать значение для изотропной среды. Однако направление потока тепла $[110]$ в пленках с ориентацией $\{100\}$ соответствует направлению дефокусировки медленных поперечных фононов, поэтому их длина пробега будет меньше, чем $\Lambda_{iso}(\theta_1)$ (см. рис. 5.5).

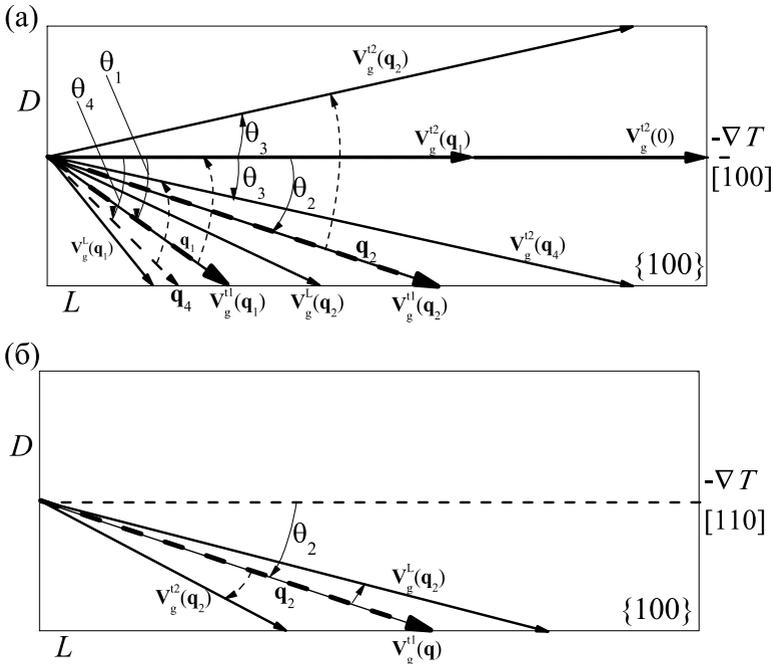


Рис. 5.5. Схема, иллюстрирующая влияние фокусировки на распространение фононов в осевом сечении пленки GaAs с ориентацией $\{100\}$ для градиента температуры в направлениях (а) $[100]$ и (б) $[110]$ и волновых векторов под углами $\theta_1^{12} = 28.6^\circ$, $\theta_2^{12} = 28.6^\circ$, $\theta_3^{12} = 12.0^\circ$ и $\theta_4^{12} = 34.4^\circ$ к направлению $[100]$.
 L – длина пленки, D – ее толщина

Для волновых векторов в плоскости $\{110\}$ фононы быстрой поперечной моды фокусируются в направлении $[110]$. Поэтому они будут отклоняться от плоскостей пленки к направлению градиента температур $[110]$, и их длина пробега может значительно превышать значение для изотропной среды (см. рис. 5.6). Из рисунка 5.6 видно, что в пленках GaAs с ориентацией $\{110\}$ фононы моды t_1 с волновыми векторами

в секторе $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ (для моды t_1 угол $\theta_4^{t1} = 25.4^\circ$) будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться в секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$, для GaAs $\theta_3^{t1} = 3.6^\circ$. В результате для направлений $[110]$ плотность состояний для моды t_1 будет существенно больше, а для направлений дефокусировки значительно меньше, чем в модели изотропной

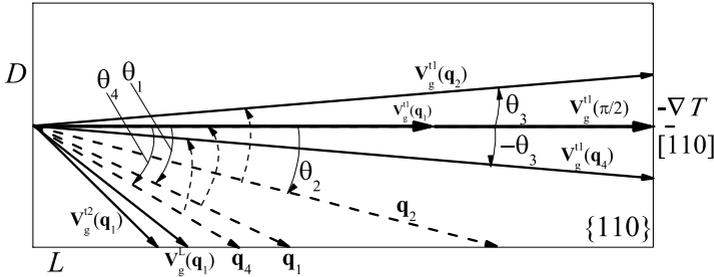


Рис. 5.6. Схема, иллюстрирующая влияние фокусировки на распространение фононов в сечении пленки GaAs с ориентацией $\{110\}$ для волновых векторов под углами $\theta_1^{t1} = 21.4^\circ$, $\theta_2^{t1} = 11.4^\circ$, $\theta_3^{t1} = 3.6^\circ$ и $\theta_4^{t1} = 25.4^\circ$ к направлению градиента температуры $[110]$

среды (см. раздел 1.5). При этом фононы моды t_1 в плоскости $\{110\}$ с волновым вектором \mathbf{q}_1 и углом θ_1 (для GaAs $\theta_1^{t1} = 21.4^\circ$) будут распространяться в направлении теплового потока $[110]$ (см. рис. 5.6), а фононы с волновым вектором \mathbf{q}_2 и углом θ_2 (для моды t_1 $\theta_2^{t1} = 11.4^\circ$) будут распространяться под углом $-\theta_3$ ($\theta_3^{t1} = 3.6^\circ$) (см. рис. 5.6). Направление $[110]$ является направлением дефокусировки медленной поперечной моды, и ее длина свободного пробега меньше, чем в изотропной среде (см. рис. 5.6). Продольные фононы фокусируются в направлении $[111]$, а направление $[110]$ соответствует направлению дефокусировки для волновых векторов в плоскости $\{110\}$. Поэтому они будут отклоняться от направления градиента температур к широкой грани образца, их длина свободного пробега будет меньше, чем для изотропной среды. Как уже отмечалось, роль продольных фононов в фононном транспорте мала в связи с малой теплоемкостью.

Рассмотрим распространение фононов в пленках из кристаллов второго типа с ориентацией $\{100\}$ на примере кристаллов CaF_2 для направления градиента температур $[001]$. Для медленной поперечной моды в плоскости грани куба спектр фононов изотропен, и эффект фо-

кусировки отсутствует. Поэтому, как видно из рисунка 5.7, направление волнового вектора \mathbf{q}_2 совпадает с направлением групповой скорости $\mathbf{V}_g^{l2}(\mathbf{q}_2)$, и, соответственно, длина пробега $\Lambda_{\{100\}}^{l2}(\theta_2) = \Lambda_{iso}(\theta_2)$. Для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ фононы быстрой поперечной моды в направлении $[001]$ дефокусируются. Поэтому они будут отклоняться от направления градиента температур $[001]$ к плоскостям пленки, и их длина пробега будет значительно меньше, чем для изотропной среды (см. рис. 5.7а). В направлении $[001]$ фокусируются продольные фононы, и их длины пробега в пленках из кристаллов второго типа будут больше, чем Λ_{iso} .

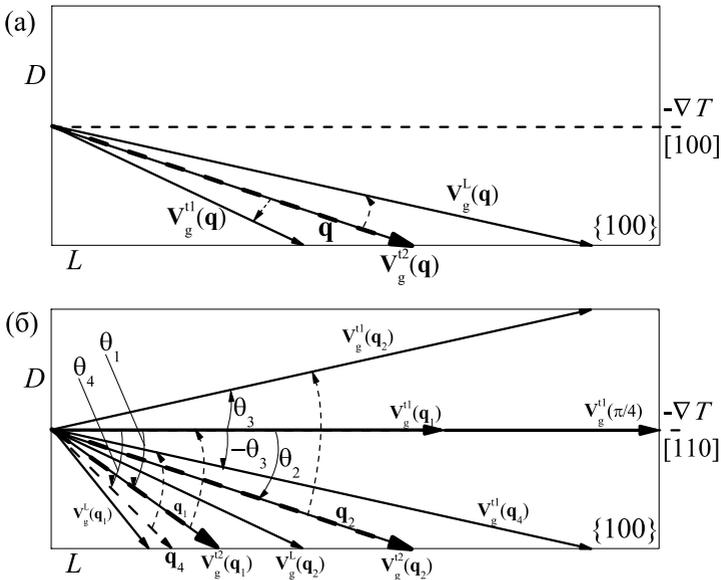


Рис. 5.7. Схема, иллюстрирующая влияние фокусировки на распространение фононов в сечении пленки CaF₂ с ориентацией $\{100\}$ для волновых векторов под углами $\theta_1^{l1} = 25.9^\circ$, $\theta_2^{l1} = 13.4^\circ$, $\theta_3^{l1} = 7.8^\circ$ и $\theta_4^{l1} = 31.0^\circ$ к направлению градиента температуры $[\bar{1}10]$

Обратная ситуация складывается для пленок с ориентацией $\{100\}$ из кристаллов второго типа для направления градиента температур $[011]$. В этом направлении фононы быстрой поперечной моды фокусируются, поэтому они будут отклоняться от плоскостей пленки к на-

правлению теплового потока и их длина пробега может значительно превышать значение Λ_{iso} (см. рис. 5.7а). Из рисунка 5.7б видно, что в пленках CaF_2 ориентацией $\{100\}$ фононы моды t_1 с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ (для моды t_1 $\theta_4^{t_1} = 31^\circ$) будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться в секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$, для CaF_2 $\theta_3^{t_1} = 7.8^\circ$. В результате для направлений $[110]$ плотность состояний для моды t_1 будет существенно больше, а для направлений дефокусировки значительно меньше, чем в модели изотропной среды (см. раздел 1.5). При этом фононы моды t_1 в плоскости $\{110\}$ с волновым вектором \mathbf{q}_1 и углом θ_1 (для CaF_2 $\theta_1^{t_1} = 25.9^\circ$) будут распространяться в направлении теплового потока $[110]$, а их длина свободного пробега будет ограничиваться или длиной пленки или объемными механизмами релаксации фононов (см. рис. 5.7). Фононы с волновым вектором \mathbf{q}_2 и углом θ_2 (для моды t_1 $\theta_2^{t_1} = 13.4^\circ$) будут распространяться под углом $-\theta_3$ ($\theta_3^{t_1} = 7.8^\circ$) (см. рис. 5.7б).

Для медленной поперечной моды в плоскости грани куба спектр фононов изотропен и эффект фокусировки для пленок CaF_2 отсутствует. Поэтому направление групповой скорости $\mathbf{V}_g^{t_1}(\mathbf{q}_2)$ совпадает с направлением волнового вектора \mathbf{q}_2 , и, соответственно, длина пробега $\Lambda_{[100]}^{t_2, \{100\}}(\theta_2) = \Lambda_{iso}(\theta_2)$ (см. рис. 5.7б). В направлении $[011]$ продольные фононы дефокусируются. Поэтому угол распространения, определяемый направлением групповой скорости $\mathbf{V}_g^L(\mathbf{q}_2)$, становится больше, чем угол θ_2 и, соответственно, длина пробега $\Lambda_{[110]}^L(\theta_2)$ становится меньше, чем $\Lambda_{iso}(\theta_1)$ (см. рис. 5.7б).

5.4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, в пятой главе изучено влияние анизотропии упругой энергии на фоновый транспорт в монокристаллических пленках в режиме кнудсеновского течения фоновый газ. Проанализировано влияние фокусировки фононов на распространение фоновых мод и фоновый транспорт в монокристаллических пленках с различным типом анизотропии упругой энергии. Основные результаты исследований фоновый транспорт в пленках из кристаллов первого GaN , GaAs , Ge , MgO , Si , алмаз, YAG и второго типа NaCl , CaF_2 , SrF_2 , YIG могут быть сформулированы следующим образом:

1. Анализ распределения длин пробега фононов по углам в плоскостях пленок, позволил установить физические причины, приводящие к изотропной зависимости теплопроводности для квадратных пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$. Показано, что для произвольного направления потока тепла область усреднения длин пробега по углам в плоскости пленок захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому теплопроводность, а также длины пробега фононов различных поляризаций для кристаллов обоих типов становятся изотропными. Их анизотропия теплопроводности в режиме граничного рассеяния определяется полностью зависимостью от ориентации плоскости пленки. В пленках с ориентациями плоскостей $\{100\}$ средние длины свободного пробега для всех кристаллов первого типа оказываются больше, а в пленках из кристаллов второго типа меньше, чем в модели изотропной среды. Однако в пленках с ориентациями $\{111\}$ реализуется обратная ситуация: средние длины пробега в пленках из кристаллов первого типа оказываются меньше, а из кристаллов второго типа больше, чем в модели изотропной среды.

2. В квадратных пленках с ориентацией $\{110\}$ угол между направлениями фокусировки и дефокусировки увеличивается в два раза по сравнению с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$, поэтому для произвольного направления потока тепла при усреднении длин пробега по углам в плоскости пленок оба направления не могут быть одновременно охвачены. В связи с этим теплопроводность в плоскости пленки $\{110\}$ становится анизотропной, как и вклады акустических мод. Максимальные значения теплопроводности для этих пленок из кристаллов первого типа достигаются в направлениях $[001]$, а минимальные - в направлениях $[110]$. Для пленок из кристаллов второго типа направления максимальных и минимальных значений обратны кристаллам первого типа.

3. С увеличением длины пленок интервалы углов, дающих основной вклад при усреднении длин свободного пробега в плоскости пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$, значительно сужаются. Поэтому в предельном случае длинных пленок ($L \gg W$) усреднение по углам оказывается уже недостаточным, чтобы размыть эффект фокусировки фононов. В этом случае длины пробега в пленках из кристаллов обоих типов с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ становятся анизотропными.

4. Анализ влияния фокусировки на распространение фононных мод в пленках из кристаллов первого типа показал, что для квадратных

пленок с ориентацией $\{100\}$ для быстрых и медленных поперечных фононов преобладает эффект фокусировки. В то время как в пленках с плоскостью $\{111\}$ для медленной поперечной моды преобладает эффект дефокусировки. Поэтому теплопроводность и средние длины свободного пробега в пленках из кристаллов первого типа с ориентациями $\{100\}$ оказываются в 2-2.4 раза больше, чем для пленок с ориентациями $\{111\}$.

5. Анализ распределения длин пробега в поперечном сечении квадратных пленок с ориентацией $\{100\}$ показал, что в пленках из кристаллов второго типа для поперечных фононов преобладает эффект дефокусировки. Поэтому средние длины пробега фононов в пленках с ориентациями $\{100\}$ из кристаллов второго типа оказываются меньше, а из кристаллов первого типа – больше, чем в модели изотропной среды. Для пленок с ориентацией $\{111\}$ – ситуация обратная: в пленках из кристаллов второго типа для быстрой поперечной моды преобладает эффект фокусировки, тогда как для поперечных фононов в пленках из кристаллов первого типа – эффект дефокусировки. В результате средние длины пробега в пленках с ориентацией $\{111\}$ из кристаллов второго типа оказываются больше, а из кристаллов первого типа – меньше, чем в модели изотропной среды.

Глава 6. АНИЗОТРОПИЯ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КРЕМНИЕВЫХ ПЛЕНОК И НАНОПРОВОДОВ

В работах [4-7] 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 0.02 до 1.6 мкм в интервале от 17 до 350 К. Полученные результаты интерпретировались, как правило, в модели изотропной среды [4-7,25,110]. Использовалась или теория Казимира [13], или теория Фукса и Зондгеймера [30,31], а эффекты, обусловленные фокусировкой фононов, не учитывались. В теории Фукса и Зондгеймера [30,31] предполагалось, что теплопроводность пленки зависит только от одного параметра - её толщины. Это приближение является некорректным. В работах [24,27,106] (см. также главу 4) показано, что длины свободного пробега в кремниевых пленках существенным образом зависят от их геометрических параметров. Более того, длины Казимира логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности. В модели изотропной среды эта расходимость для теплопроводности пленок отмечалась ранее в работах [25,32]. Анализ теплопроводности монокристаллических пленок, проведенный в работах [27,106], показал, что длины Казимира для них также логарифмически расходятся, когда ширина пленки стремится к бесконечности. Их величины для фононов различных поляризации в отличие от изотропной среды значительно различаются. Как было показано в предыдущей главе, теплопроводность пленки в значительной степени зависит от ориентации её плоскости. Следует отметить, что при изложении экспериментальных результатов в обзорах [1-3], а также в работах [4-7], не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей.

В отличие от ранее опубликованных работ при описании температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок и нанопроводов мы учтем фокусировку фононов и используем скорости релаксации фононов на границах образцов, рассчитанные в работах [20,21] (см. также формулы (3.15) и (3.16)). Покажем что при учете фокусировки фононов изменение ориентации кремниевой пленки может приво-

дуть к изменению значений теплопроводности более, чем в 2 раза. Отсутствие информации об ориентации плоскости пленки создает определенные трудности при интерпретации результатов эксперимента [5-7] (см. раздел 6.2). В разделе 6.1 рассчитаны зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов от температуры для различных направлений теплового потока относительно кристаллографических осей. В разделе 6.2 проанализирована анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок, имеющих различные ориентации плоскостей.

6.1. ФОНОННЫЙ ТРАНСПОРТ В КРЕМНИЕВЫХ НАНОПРОВОДАХ

В работе [4] были измерены температурные зависимости теплопроводности монокристаллических кремниевых нанопроводов с диаметрами от 22 до 115 нм в интервале температур от 20 до 300 К. Нанопровода были выращены с осью в направлении [111]. Было 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 при расчете теплопроводности этих нанопроводов может быть использован фононный спектр для объемных кристаллов Si. Очевидно, что при анализе теплопроводности наноразмерных образцов в исследованном интервале температур 20 - 300 К необходимо учитывать дисперсию спектра. Для её учета, как и в главе 3, используется аппроксимационный спектр тепловых фононов в Si (см. 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 пределе длинных волн $x \ll 1$ она переходит в модель анизотропного континуума [63].

6.1.1. 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. раздел 3.1). Полную теплопроводность в этой модели, согласно (3.10) и (3.11), можно представить в виде аддитивной суммы этих вкладов:

$$\kappa_{diff[I(\psi)]} = \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^{\lambda})^2 z_{\lambda}^2 x^2}{v_{[I(\psi)]}^{\lambda} (sh(z_{\lambda}/2))^2} dx, \quad (6.1)$$

$$\kappa_{drift[I(\psi)]}^{(1)} = \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \sum_{\lambda} B_{[I(\psi)]}^{(1)}(T) \Psi_{N[I(\psi)]}^{\lambda}$$

Обозначения приведены в разделе 3.1. В отличие от образцов с квадратным и прямоугольным сечением в нанопроводах с круглым сечением теплопроводность зависит только от одного ориентационного параметра – направления потока тепла относительно осей кристалла $[I(\psi)]$ (угол ψ определяет направление потока тепла). В полную скорость релаксации фононов $v_{[I(\psi)]}^{\lambda} = v_{[I(\psi)]R}^{\lambda}(q) + v_N^{\lambda}(q)$ дают вклады резистивные $v_{[I(\psi)]R}^{\lambda}$ и нормальные $v_N^{\lambda}(q)$ процессы релаксации фононов. Нормальные процессы обуславливают дрейфовый вклад в теплопроводность (см. раздел 3.1). В качестве резистивных процессов рассеяния рассматривается рассеяние фононов на изотопическом беспорядке $v_{iso}^{\lambda}(q)$, граница образца $v_{[I(\psi)]B}^{\lambda}$ и в процессах фонон-фононного переброса $v_U^{\lambda}(q)$. Скорости релаксации фононов в объемных механизмах релаксации $v_{iso}^{\lambda}(q)$, $v_U^{\lambda}(q)$ и $v_N^{\lambda}(q)$ определены формулами (3.5), (3.6), (3.17)–(3.19).

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

$$v_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(x, \theta, \varphi) = \frac{3\pi V_{g\perp}^{\lambda}}{4D} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[\left(1 + (A^{\lambda})^2 \right) \sqrt{1 - (A^{\lambda})^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (A^{\lambda})^2} \right)^3 - A^{\lambda} \left(\arccos A^{\lambda} + A^{\lambda} \sqrt{1 - (A^{\lambda})^2} \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (6.2)$$

а при выполнении противоположного неравенства

$$v_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(x, \theta, \varphi) = (3\pi V_{g\perp}^{\lambda}) / 4D, \quad V_{g\perp}^{\lambda} = \sqrt{(V_g^{\lambda})^2 - (V_{g3}^{\lambda})^2}. \quad (6.3)$$

Далее при анализе теплопроводности нанопроводов спектр и групповые скорости фононов определим в системе координат по ребрам куба. Будем считать, что направление градиента температур и продольной оси нанопровода совпадают. Рассмотрим вращение потока тепла (оси образца) в диагональной плоскости. Эта плоскость захватывает все симметричные направления, включая и направление оси нанопровода [111], в котором исследовался фононный транспорт в работе [4]. Пусть угол ψ задает отклонение потока тепла в диагональной плоскости от оси Z , направленной по ребру куба. Тогда компонента групповой скорости V_{g3}^{λ} , параллельная градиенту температуры, может быть определена выражением

$$\begin{aligned} \nabla_r T = \{ \nabla_x T, \nabla_y T, \nabla_z T \} = |\nabla_r T| \{ -\sin\psi / \sqrt{2}, \sin\psi / \sqrt{2}, \cos\psi \}, \\ V_{g3}^{\lambda} = (-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) \sin\psi / \sqrt{2} + V_{gz}^{\lambda} \cos\psi. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Учет дисперсии фононов приводит к тому, что групповая скорость, параметр $\Delta^{\lambda}(\psi, x, \theta, \varphi)$, а также скорости релаксации $v_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(x, \theta, \varphi)$ в формулах (6.2) и (6.3) становятся зависящими не только от углов ψ, θ, φ , но и от приведенного волнового вектора фонона x (см. раздел 3.2). Как видно из формул (6.1) - (6.3), зависимости теплопроводности от направления градиента температуры относительно осей кристалла $[I(\psi)]$ определяются величинами компонент групповой скорости фононов $V_{g3}^{\lambda}(\psi)$ и $V_{g\perp}^{\lambda}$, которые входят непосредственно в теплопроводность и в скорости релаксации $v_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(x, \theta, \varphi)$.

Следует отметить, что при измерении температурных зависимостей теплопроводности [19] 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 [8,9,14,15]. Для наноразмерных образцов такая процедура технически невозможна. Поэтому учтем частичную зеркальность отражения фоно-

нов от границ нанопроводов. Учет её производится обычным образом [8,9,14,15,35]:

$$\tilde{\nu}_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(\theta, \varphi) = \frac{(1 - P)}{(1 + P)} \nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(\theta, \varphi). \quad (6.5)$$

Для иллюстрации влияния различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов в различных температурных интервалах на рисунке 6.1 приведены результаты расчета теплопроводности при включении различных механизмов рассеяния фононов. В низкотемпературной области, когда доминирует рассеяние фононов на границах, теплопроводность следует зависимости $\kappa(T) \sim T^3$. Однако для полностью диффузного рассеяния фононов на границах нанопровода теоретическая кривая (кривая 6) 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 дополнительных подгоночных параметров (см. рис 6.1, кривая 2). Далее параметр $P = 0.15$ используется нами во всех расчетах, приведенных на рисунке 6.1. Как видно из рисунка 6.1, при температурах выше 60 К значительную роль в теплосопротивлении играют ангармонические процессы рассеяния. В расчетах температурных зависимостей теплопроводности нанопроводов за основу мы взяли параметры ангармонических процессов рассеяния, найденные ранее в работе [22] для объемных кристаллов Si (см. также таблицу 6.1). Для этих параметров нам удалось согласовать результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности объемных кристаллов Si с прямоугольным и квадратным сечениями с экспериментальными данными [19] для различных направлений градиента температуры и боковых граней образцов в интервале температур 3 – 40 К. Следует отметить, этот интервал захватывает фактически только область максимума теплопроводности в объемных кристаллах Si. Этот интервал температур является слишком узким для определения параметров ангармонического рассеяния. Поэтому при анализе теплопроводности кремниевых нанопроводов в интервале 20 – 300 К мы уточнили параметры ангармонизма. Для лучшего согласия результатов расчета с данными [4] мы увеличили параметр

A_U^1 , характеризующий частоту релаксации фононов для быстрой поперечной моды в процессах переброса (см. таблицу 3.1 и таблицу 6.1).

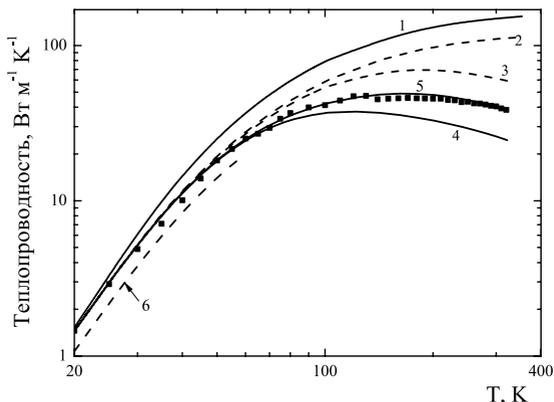


Рис. 6.1. Температурные зависимости теплопроводности нанопровода с $D = 115$ нм, $L = 3$ мкм и $P = 0.15$ для направления градиента температуры [111] при включении различных механизмов рассеяния фононов: кривая 1 – режим граничного рассеяния $\nu = \tilde{\nu}_{B[111]}^\lambda$, кривая 2 – $\nu = \tilde{\nu}_{B[111]}^\lambda + \nu_{iso}$, 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 ■ – экспериментальные данные [4]

Следует отметить, что для наноразмерных образцов величины теплопроводности в температурном интервале 20 – 300 К значительно слабее зависят от параметров ангармонизма из-за более существенной (чем в объёмных материалах) роли граничного рассеяния (см. далее).

Таблица 6.1

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

| $A_N^l, \text{K}^{-5}\text{c}^{-1}$ | $A_N^t, \text{K}^{-5}\text{c}^{-1}$ | $A_U^l, \text{K}^{-3}\text{c}^{-1}$ | $A_U^t, \text{K}^{-3}\text{c}^{-1}$ | $A_U^{t2}, \text{K}^{-3}\text{c}^{-1}$ | 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 |

Рассмотрим вклад дрейфового движения фононов в теплопроводность кремниевых нанопроводов в интервале температур от 20 до 300 К. Проведенный анализ показал, что этот вклад для поперечных фононов

во всем температурном интервале мал по сравнению с диффузионным вкладом и им можно пренебречь (см. рис. 6.2). Для продольных фононов при $T < 60$ К дрейфовый вклад в теплопроводность $\kappa_{[111]dr}^{(1)L}(T)$ значительно меньше диффузионного. Однако при более высоких температурах $100 \text{ К} < T < 300 \text{ К}$ для них доминируют нормальные процессы фонон-фононного рассеяния, и он значительно превосходит вклад диффузионного движения (см. рис. 6.2). Для нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм при $T=100$ К вклад $\kappa_{[111]dr}^{(1)L}(T)$ составляет 13% и 9% от полной теплопроводности, а при $T=300$ К он достигает 35%. Как видно из рисунка 6.2, учет дрейфового движения продольных фононов позволяет согласовать результаты расчета с экспериментальными данными [4] во всем исследованном интервале температур. Для оценки анизотропии

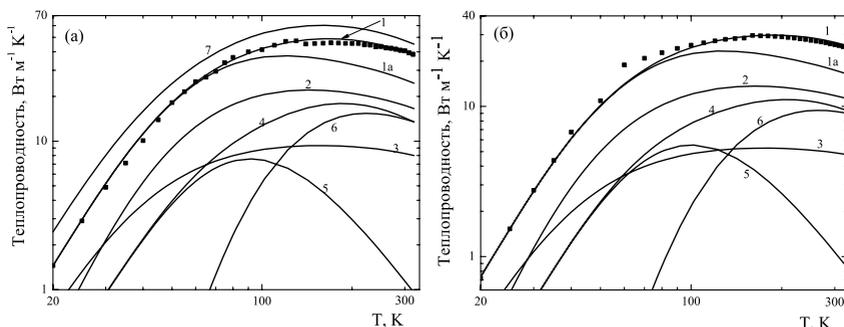


Рис. 6.2. Температурные зависимости теплопроводности в направлении [111] для нанопроводов с диаметрами: (а) $D = 115$ нм и (б) $D = 56$ нм. Кривые 1 – полные теплопроводности, кривые 1а – вклады диффузионного движения, кривые 2, 3 и 4 – вклады быстрых, медленных поперечных и продольных фононов, соответственно; кривые 5 и 6 – диффузионные и дрейфовые вклады продольных фононов. Кривая 7 – полная теплопроводность для направления [100]. Символы ■ – экспериментальные данные [4]

теплопроводности кремниевых нанопроводов мы рассчитали температурные зависимости $\kappa_{[l(\psi)]}(T)$ для направлений градиента температуры [111] и [100] (см. рис. 6.2а, кривые 1 и 7). Как следует из расчета, при $T=20$ К отношение теплопроводностей $\kappa_{[100]}/\kappa_{[111]}$ для нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм составляет 1.7, а при $T=300$ К оно уменьшается до 1.2. Можно отметить, что для объемных стержней кремния при $T=3$ К отношение $\kappa_{[100]}/\kappa_{[111]}$ равно 1.50, а выше температуры максимума стремится к единице (см. главу 3).

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. Из рисунка 6.2 видно, что при низких температурах $T < 30$ К доминирующий вклад в теплопроводность вносит медленная поперечная мода $\kappa^{t2}(T)$. При $T=20$ К ее вклад составляет 49% и в два раза превосходит вклад быстрой поперечной моды. Однако с повышением температуры вклад быстрой поперечной моды $\kappa^{t1}(T)$ возрастает значительно быстрее, чем вклад медленной поперечной моды $\kappa^{t2}(T)$, и при $T>30$ К значения $\kappa^{t1}(T)$ становятся больше, чем $\kappa^{t2}(T)$ (см. рис. 6.2). Поэтому во всем интервале температур от 30 до 300 К доминирующий вклад в теплопроводность вносит быстрая поперечная мода. Замедление роста вклада медленной поперечной моды $\kappa^{t2}(T)$ с повышением температуры связано с сильной

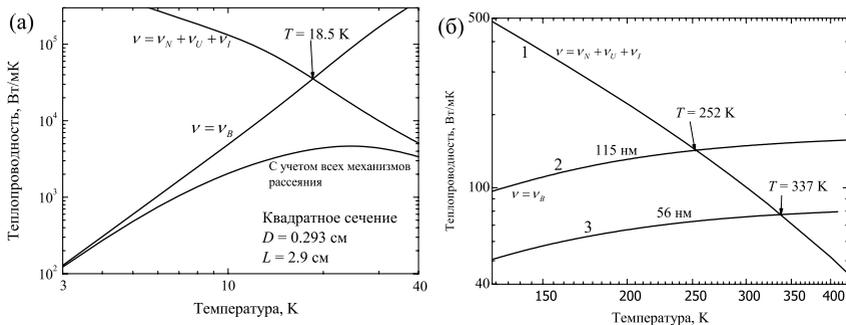


Рис. 6.3. Температурные зависимости теплопроводности (а) – в объемных образцах, (б) – в нанопроводах в направлении $[111]$: кривые 1 – для объемных механизмов релаксации фононов, кривые 2 и 3 – для режима граничного рассеяния фононов в нанопроводах с диаметрами $D=115$ нм и $D=56$ нм, соответственно

дисперсией моды t_2 . Наличие протяженных плоских участков в коротковолновом спектре медленной поперечной моды при $q_{\max}/2 < q < q_{\max}$ (см. рис. 1.5) приводит к аномально низким значениям групповой скорости и, соответственно, к значительному уменьшению вклада $\kappa^{t2}(T)$ с повышением температуры. Вклад продольных фононов в теплопроводность при $T=20$ К значительно меньше вкладов поперечных фононов и составляет 19%. Однако с повышением температуры этот вклад быстро возрастает за счет дрейфового движения и при $T>65$ К стано-

вится больше вклада медленной поперечной моды. При $T=190$ К вклад $\kappa^L(T)$ достигает максимума и составляет 36% полной теплопроводности.

На рисунке 6.3 приведены температурные зависимости полной теплопроводности в режиме граничного ($\nu = \nu_B$) и объемных ($\nu = \nu_{iso} + \nu_U + \nu_N$) механизмов релаксации фононов. Пересечение этих кривых 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_U сравниваются, и граничное рассеяние обеспечивает 50% полного теплосопrotivления. Численный анализ показал, что для кремниевых нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм температуры перехода T_{BV} составляют 265 и 353 К, соответственно. Как видно из рисунка 6.3, для объемных материалов температуры перехода T_{BV} на порядок меньше. При комнатной температуре для нанопроводов с диаметрами 56 и 115 нм вклад граничного рассеяния в теплосопrotivление составляет соответственно 60% и 42%.

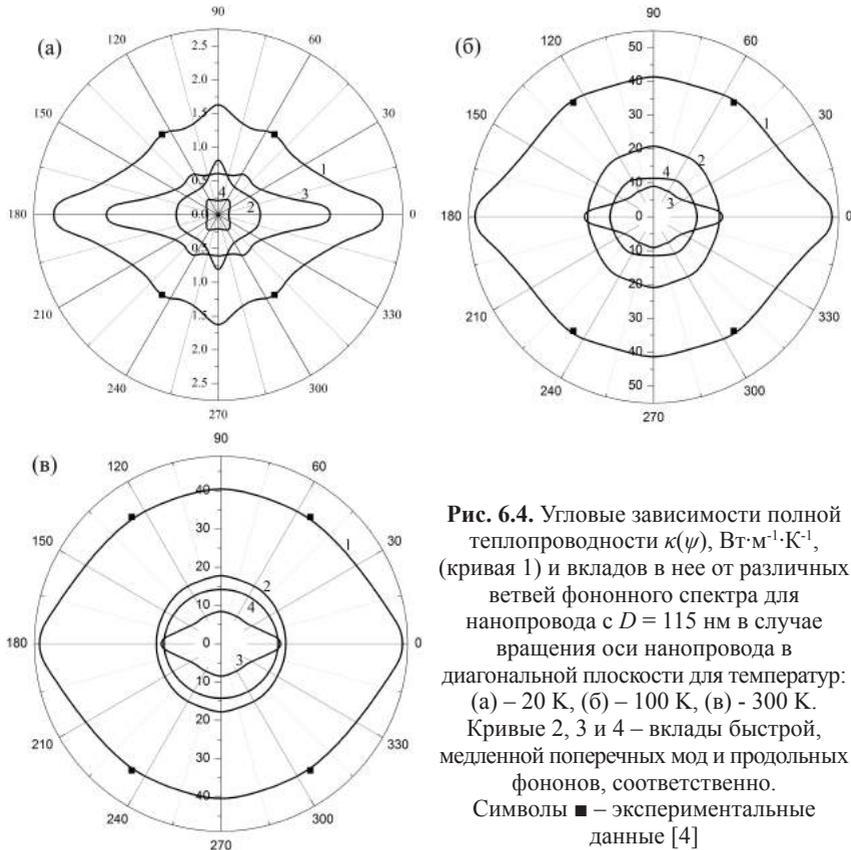
6.1.2. Анизотропия теплопроводности кремниевых нанопроводов

Рассмотрим изменение анизотропии полной теплопроводности и вкладов в неё от различных ветвей фононного спектра при повышении температуры. Для этого проанализируем изменение угловых зависимостей теплопроводности кремниевых нанопроводов с температурой при вращении градиента температуры (оси образца) в диагональной плоскости. Необходимые для этого анализа компоненты групповой скорости V_{g3}^λ и $V_{g\perp}^\lambda$ определены выражениями (6.4). В них угол ψ задает отклонение потока тепла от оси Z , направленной по ребру куба.

Результаты расчета угловых зависимостей теплопроводности кремниевых нанопроводов приведены на рисунках 6.4. Как видно из рисунков, 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. 6.4а). Отношение $\kappa_{[001]} / \kappa_{\min} \cong 1.8$ определяет максимальную анизотропию теплопроводности при этой температуре. В направлении

ях [011] и [111] достигаются локальные максимумы теплопроводности за счет фокусировки быстрых поперечных и продольных фононов, соответственно (см. рис. 6.4а).

Отношение величин теплопроводности в симметричных направлениях для нанопровода с $D = 115$ нм составляет $\kappa_{[001]} : \kappa_{[011]} : \kappa_{[111]} = 1.69:1.12:1$. Для нанопровода с $D = 56$ нм анизотропия оказывается несколько выше: $\kappa_{[001]} : \kappa_{[011]} : \kappa_{[111]} = 1.74:1.13:1$. Из рисунков 6.4 видно, что анизотропия



теплопроводности кремниевых нанопроводов обеспечивается, главным образом, медленной поперечной модой, для которой отношение $\kappa_{[100]}^{r2} / \kappa_{[110]}^{r2}$ равно 2.7, 2.3 и 1.85 при температурах 20, 100 и 300 К,

соответственно. Это показывает, что уменьшение анизотропии теплопроводности с ростом температуры обусловлено главным образом уменьшением вклада медленной моды (см. Рис. 6.4). При $T=20$ К вклад быстрой поперечной моды $\kappa_{[100]}^{r1}$ для направлений $[001]$ оказывается меньше вклада $\kappa_{[100]}^{r2}$ 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 $\kappa_{[111]}^{r2}$ 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 49 и 30%, соответственно. При $T=100$ К эти вклады становятся почти изотропными, поэтому анизотропия полной теплопроводности уменьшается до 26% (см. рис. 6.4б). Отношение величин теплопроводности для симметричных направлений при $T=100$ К составляет $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} : \kappa_{[011]} \cong 1.3 : 1 : 1$. 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 $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} : \kappa_{[011]} = 1.2 : 1 : 1$. 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. При $T=300$ К для нанопровода с $D=56$ нм отношение значений теплопроводности в симметричных направлениях увеличивается незначительно: $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} : \kappa_{[011]} = 1.2 : 1 : 1$. Итак, проведенный анализ показал, что анизотропия теплопроводности в кремниевых нанопроводах обеспечивается, главным образом, медленной поперечной модой, которая фокусируется в направлении $[100]$ и обеспечивает максимум теплопроводности в этом направлении. Уменьшение анизотропии теплопроводности с 70% при $T=20$ К до 20% при $T=300$ К связано главным образом с уменьшением вклада медленной поперечной моды в теплопроводность с ростом температуры и обусловлено дисперсией тепловых фононов.

6.2. 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 [5-7], 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 этих пленок в интервале от 17 до 40 К следовала зависимости $\kappa(T) \sim T^3$ [6,7], как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при расчете теплопроводности пленок мы использовали трехмерный спектр фононов. Для учета дисперсии тепловых фононов использовался аппроксимационный спектр [39,63] (см. также, раздел 1.2).

6.2.1. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок

Для анализа теплопроводности пленок, как и нанопроводов, воспользуемся трехмодовой моделью Каллавея [91,92,94]. 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. раздел 3.1)

$$\kappa_{dif}^{\{J\}} = \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^{\lambda})^2 Z_{\lambda}^2 x^2}{v_{[I(\psi)]}^{\{J\},\lambda} (sh(Z_{\lambda}/2))^2} dx, \quad (6.6)$$

$$\kappa_{dr}^{\{J\},(1)} = \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \sum_{\lambda} B_{[I(\psi)]}^{\{J\},(1)}(T) \Psi_{N[I(\psi)]}^{\{J\},\lambda}.$$

В полную скорость релаксации фононов $v_{[I(\psi)]}^{\{J\},\lambda}$ дают вклад резистивные $v_{R[I(\psi)]}^{\{J\},\lambda}$ и нормальные $v_N^{\lambda}(q)$ процессы релаксации фононов, последние обуславливают дрейфовый вклад в теплопроводность (см. раздел 3.1). В качестве резистивных процессов рассеяния учитывается рассеяние фононов на изотопическом беспорядке $v_{iso}^{\lambda}(q)$, границах об-

разца $v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$ и в процессах фонон-фононного переброса $v_U^\lambda(q)$. Скорости релаксации фононов $v_{iso}^\lambda(q)$, $v_U^\lambda(q)$ и $v_N^\lambda(q)$ определены формулами (3.5), (3.6), (3.17)–(3.19). Скорости релаксации фононов на границах пленок $v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$ определяются теми же функциями, что и для объемных материалов с прямоугольным сечением. 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 $|V_{g3}^\lambda|/|V_{g2}^\lambda| \geq k_0/\mu$ они имеют вид (см. раздел 3.2):

$$v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi) = \frac{|V_{g3}^\lambda|}{k_0 D} \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{(|V_{g2}^\lambda| + \mu|V_{g1}^\lambda|)}{\mu|V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2}{3} \frac{|V_{g1}^\lambda||V_{g2}^\lambda|}{\mu(V_{g3}^\lambda)^2} \right\}^{-1}. \quad (6.7)$$

При выполнении противоположных неравенств имеем:

$$v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi) = \frac{6}{D} \frac{\mu(V_{g1}^\lambda)^2}{(3\mu|V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|)} \text{ при } \mu|V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda| \quad \text{и} \quad |V_{g3}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda| < k_0,$$

$$v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi) = \frac{6}{\mu D} \frac{(V_{g2}^\lambda)^2}{(3|V_{g2}^\lambda| - \mu|V_{g1}^\lambda|)} \text{ при } \mu|V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda| \quad \text{и} \quad |V_{g3}^\lambda|/|V_{g2}^\lambda| < k_0/\mu. \quad (6.8)$$

Отметим, что при учете дисперсии скорости релаксации $v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi)$ в формулах (6.7) и (6.8), а также компоненты групповой скорости V_{g1}^λ , V_{g2}^λ и V_{g3}^λ зависят не только от углов ψ, θ, φ , но и от приведенного волнового вектора фонона x . Случай $\mu = 1$ соответствует нанопроводу с квадратным поперечным сечением.

В этом разделе сначала рассчитаем температурные зависимости теплопроводности в плоскости пленок, имеющих различные ориентации $\{J\}$. Затем для фиксированных температур проанализируем угловые зависимости теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(T)$ при вращении теплового потока в плоскости пленок, имеющих ориентаций $\{100\}$, $\{110\}$ или $\{111\}$. Это позволит исследовать изменение анизотропии теплопроводности с температурой, а также определить ориентации плоскостей и направления потока тепла, обеспечивающие максимальные или минимальные значения теплопроводности монокристаллических пленок кремния. Как и в разделе 4.1, компоненты групповой скорости V_{g1}^λ , V_{g2}^λ и V_{g3}^λ для различных ориентаций плоскости пленки $\{J\}$ определены в

системе координат, связанной с пленкой (см. формулы (4.4)). В этой системе координат ось «1» (ось вращения теплового потока), определяющая ориентацию плоскости $\{J\}$, направлена перпендикулярно плоскости пленки. Ось «3» направлена вдоль теплового потока $[I(\psi)]$. Угол ψ , определяющий направление теплового потока в плоскости $\{J\}$, отсчитывается от оси Z , направленной по ребру куба.

В отличие от объемных кристаллов, для 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 [8,9,14,15,35]

$$\tilde{v}_{B[I(\psi)]}^{\lambda, \{J\}}(P, x, \theta, \varphi) = \frac{(1-P)}{(1+P)} v_{B[I(\psi)]}^{\lambda, \{J\}}(x, \theta, \varphi), \quad (6.9)$$

где P – фактор зеркальности, который определяется из сопоставления результатов расчета теплопроводности с экспериментальными данными. Для кремниевых нанопроводов с круглым сечением в разделе 6.1 показано, что при учете фактора зеркальности $P=0.15$ результаты расчета теплопроводности нанопроводов хорошо согласуются с экспериментальными данными [4] во всей температурной области. К сожалению, для пленок при изложении экспериментальных результатов в работах [5-7] 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 $\{111\}$ (см. работу [111]). Нами показано, что для этих ориентаций в достаточно широких пленках ($L \gg D$ и $W \gg D$, $L \sim W$) теплопроводность в плоскости пленки практически не зависит от направления потока тепла (см. раздел 6.2.2). Однако зависимости их теплопроводностей от ориентации плоскости пленки является существенной: при переходе от ориентации $\{111\}$ к $\{100\}$ теплопроводность её может увеличиться более, чем в 2 раза. Поскольку информация об ориентации плоскостей пленок в [5-7] 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 6.5. В пленках с $D=1.6$ мкм

и ориентацией $\{100\}$ значения теплопроводности хорошо согласуются с данными эксперимента [6,7] 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 $\kappa_{[100]}^{\{100\}} : \kappa_{[100]}^{\{110\}} : \kappa_{[110]}^{\{111\}} = 1.2:1.1:1$. При значениях параметров $P_{\{110\}}=0.51$ и $P_{\{111\}}=0.56$ величины теплопроводности $\kappa_{[100]}^{\{110\}}(T)$ и $\kappa_{[110]}^{\{111\}}(T)$ также хорошо согласуются с экспериментальными данными и близки к значениям $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(T)$ 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

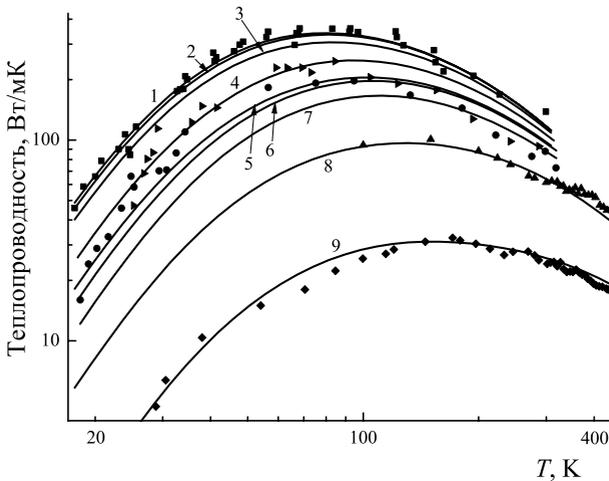


Рис. 6.5. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок для различных толщин D , параметров зеркальности P и длин пленок L : кривые 1,2,3 — $D=1.6$ мкм, $P=0.48$, $L=8$ мкм; кривая 4 — $D=0.83$ мкм, $P=0.29$, $L=8$ мкм; кривые 5,6,7 — $D=0.42$ мкм, $P=0.29$, $L=8$ мкм; кривая 8 — $D=0.10$ мкм, $P=0.14$, $L=100D$ и кривая 9 — $D=0.02$ мкм, $P=0$, $L=100D$; для ориентации плоскости пленки: кривые 1,4,5,8,9 — для ориентации $\{100\}$, кривые 2,6 — для ориентации $\{110\}$, кривые 3,7 — для ориентации $\{111\}$. Ширина пленок $W=100D$. Символы ■ ($D=1.6$ мкм), ► ($D=0.83$ мкм), · ($D=0.42$ мкм), ▲ ($D=0.10$ мкм), ◆ ($D=0.02$ мкм) — экспериментальные данные [5-7]

$P_{\{100\}}=0.29$. 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. 6.5). Отношение значений тепло-

проводности для пленок с $D=0.42$ мкм при $P_{\{100\}}=0.29$ и $T=20$ К с различной ориентацией плоскостей составляет $\kappa_{\{100\}}^{\{100\}} : \kappa_{\{100\}}^{\{110\}} : \kappa_{\{100\}}^{\{111\}} = 1.6:1.4:1$. Как видно из рисунка 6.5, 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 температуре $T = 20$ К для различных ориентаций плоскости пленки составляют $\kappa_{\{100\}}^{\{100\}} : \kappa_{\{100\}}^{\{110\}} : \kappa_{\{100\}}^{\{111\}} = 2.2:1.5:1$ (см. рис. 6.6). Для пленки с $D = 20$ нм параметр зеркальности P , по-видимому, близок к нулю – температурная зависимость теплопроводности для нее удовлетворительно описывается для значения $P = 0$. Из рисунка 6.6 следует, что с увеличением температуры возрастает роль объемных механизмов рассеяния, и анизотропия теплопроводности уменьшается.

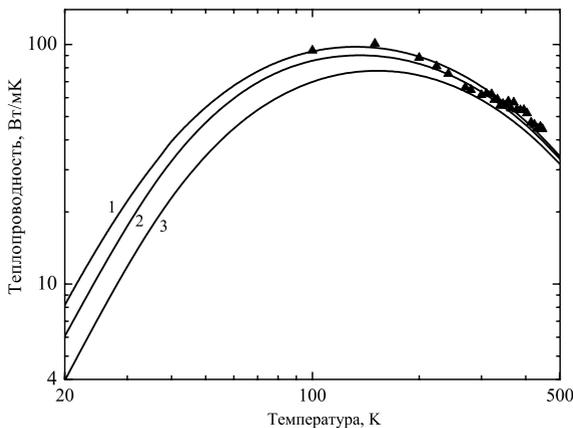


Рис. 6.6. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок толщиной $D = 100$ нм, шириной $W=100D$ и длиной $L=W$ для различных ориентаций $\{J\}$ и направлений теплового потока $[I(\psi)]$: кривые 1 – $\{100\}[100]$; 2 – $\{110\}[100]$; 3 – $\{111\}[112]$. Параметр зеркальности $P = 0.14$. Символы – экспериментальные данные [5]

При этом зависимость теплопроводности от ориентации плоскости пленки также ослабляется: если при $T = 20$ К и $\mu = 100$ отношение теплопроводностей для ориентаций $\{100\}$ и $\{111\}$ равно 2.2, то при

$T = 320$ К оно уменьшается до 1.2. Итак, при диффузном рассеянии фононов на границах максимальной теплопроводностью обладают кремниевые пленки с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью – пленки 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. 6.7). 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. 6.7). При $\mu = 20(L/D)$ (например, для $D = 1.6$ мкм величина $\mu = 100$) теплопроводность всего лишь на 0.5%

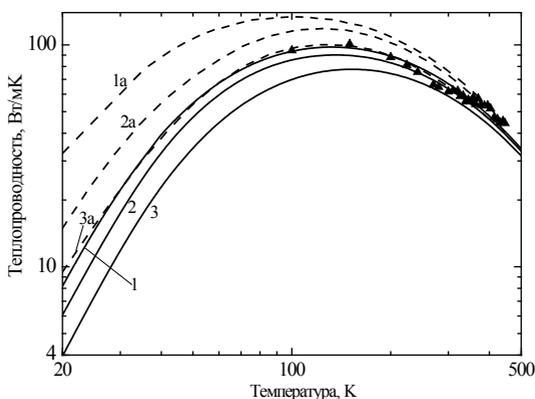


Рис. 6.7. Зависимости теплопроводности кремниевых пленок от параметра μ при $L = 8$ мкм и толщинах пленки D : кривые 1,2,3 – $D = 1.6$ мкм, кривые 4,5,6 – $D = 0.42$ мкм; и ориентаций плоскости пленки $\{J\}$: кривые 1,4 – $\{J\} = \{100\}$, кривые 2,5 – $\{J\} = \{110\}$, кривые 3,6 – $\{J\} = \{111\}$

меньше предельного значения. Что касается зависимости теплопроводности от длины пленки, то при фиксированных величинах D и W 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, [5-7,28,29]) граничное рассеяние фононов в достаточно тонких пленках ($D \ll L$ и $D \ll W$) учитывалось аналогично тому, как это было сделано в работах Фукса [30] и Зондгеймера [31] при анализе проводимости тонких металлических пленок. При этом предполагалось, что длины свободного пробега и

времена релаксации фононов в пленках зависят только от её толщины [5-7,28,29]. В модели изотропной среды граничное рассеяние не приводило к анизотропии теплопроводности [5-7,25,110]. Непосредственное обобщение результатов [30,31] 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 [28]

$$v_B^\lambda(\theta, \varphi) = \left(\frac{1-P}{1+P} \right) \frac{V_{g1}^\lambda}{D}. \quad (6.10)$$

Способ определения фактора зеркальности P и его связь с шероховатостью поверхности не меняет суть проблемы [8,14,28,29,30,31,112]. Учет граничного рассеяния в виде (6.10) приводит к некорректным результатам для зависимости теплопроводности от геометрических параметров и ориентаций плоскостей пленок. Согласно анализу, проведенному в работах [27,106], теплопроводность пленок и длин пробега фононов существенно образом зависит не только от ширины пленки, но и от остальных геометрических размеров. Более того, в [25,27,32,106] 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 [25,32], эта расходимость обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. Как показано в [27,106] (см. также раздел 4.2.1), учет конечной длины приводит к устранению этой расходимости.

Расчет температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок, проведенный в [28] согласно выражению (6.10), показал, что её максимальные значения достигаются для ориентации $\{110\}$, а минимальные – для ориентации $\{100\}$ (см. [28], 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 противоречат экспериментальным данным [19] и результатам [27,106]. В [19] показано, что в двух одинаковых образцах Si с прямоугольным сечением и градиентом температуры в направлении $[110]$ теплопроводность образ-

ца с широкой гранью $\{100\}$ оказалась на 33% выше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$. Этот результат противоположен выводу, полученному в [28]. Следует отметить, что расчеты теплопроводности объемных образцов Si с использованием выражений (6.7) и (6.8) хорошо согласуются с экспериментальными данными [19]. Они количественно описывают зависимости теплопроводности Si, как от направления теплового потока, так и от ориентации боковых граней образцов (см. [22]).

В связи с этим мы пересчитали температурные зависимости теплопроводности кремниевой пленки с толщиной $D = 100$ нм и параметром зеркальности $P_{\{100\}} = 0.14$ с использованием формулы (6.10) для трех ориентаций её плоскости (см. штриховые линии 1а, 2а и 3а на рис. 6.8) и сравнили с нашими результатами (сплошные линии 1, 2 и 3 на рис. 6.7 и 6.8). Как видно из рисунка, полученные результаты (кривые 1а, 2а и 3а) качественно согласуются с нашими результатами, т.е. максимальной теплопроводностью обладает плоскость с ориентацией $\{100\}$,

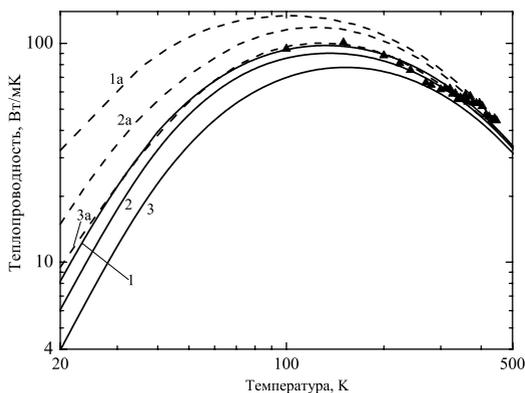


Рис. 6.8. Температурные зависимости теплопроводности в кремниевых пленках толщиной $D = 100$ нм, шириной $W=100D$ и длиной $L=W$ для различных ориентаций плоскости пленки и градиента температуры: кривые 1,1а – $\{100\}$ $[100]$; 2,2а – $\{110\}$ $[100]$; 3,3а – $\{111\}$ $[112]$. Кривые 1,2,3 – расчет с использованием выражений (6.7) и (6.8) для времени релаксации, кривые 1а,2а,3а – расчет с временем релаксации (6.10). Параметр зеркальности $P = 0.14$. Символы – эксперимент [5]

а минимальной теплопроводностью – плоскость с ориентацией $\{111\}$. Очевидно, что авторы [28] допустили ряд численных ошибок при расчете температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пле-

нок для различных ориентаций. Однако количественно температурные зависимости, полученные нами с использованием выражений для скоростей релаксации фононов на границах (6.7) и (6.8), значительно отличаются от результатов, полученных с использованием формулы (6.10) (см. рис. 6.8). Использование наших выражений для скорости релаксации фононов на границах пленок при температуре $T = 20$ К для различных ориентаций плоскости пленки дает отношения $\kappa_{[100]}^{\{100\}} : \kappa_{[100]}^{\{110\}} : \kappa_{[110]}^{\{111\}} = 2.2 : 1.5 : 1$. Тогда как при использовании формулы (6.10) имеем: $\kappa_{[100]}^{\{100\}} : \kappa_{[100]}^{\{110\}} : \kappa_{[112]}^{\{111\}} = 3.4 : 1.6 : 1.0$. Итак, при диффузном рассеянии на границах максимальной теплопроводностью обладает пленки Si с ориентацией $\{100\}$, а минимальной - с ориентацией $\{111\}$. Мы привели подробное обсуждение ориентационной зависимости теплопроводности, поскольку эта проблема играет важную роль в кремниевой микроэлектронике.

Как уже отмечалось ранее, использование термина «рассеивающие способности» плоскостей пленок с различной ориентацией для характеристики влияния фокусировки фононов на их теплопроводность является физически некорректным. В теории Казимира предполагается, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца. Поэтому в каждой точке поверхности независимо от её ориентации все фононы независимо от их поляризаций рассеиваются диффузно. Поэтому интенсивность рассеяния фононов в пленках с различной ориентацией плоскостей одинакова. Анализ, проведенный в главе 5, показал, что анизотропия теплопроводность пленок обусловлена влиянием фокусировки на распространение фононных мод в пленках. Геометрические построения, приведенные в главе 4, показывают (см. рис. 4.4, 4.5), что при совпадении направлений фокусировки и градиента температуры поток фононов от нагревателя к холодильнику отклоняется к направлению оси пленки, и длины свободного пробега для этих фононов становятся больше, чем в изотропной среде.

Для иллюстрации влияния различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок в различных температурных интервалах на рисунке 6.9 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 [6,7]. 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. 6.9, кривая 6). Далее при анализе температурных зависимостей

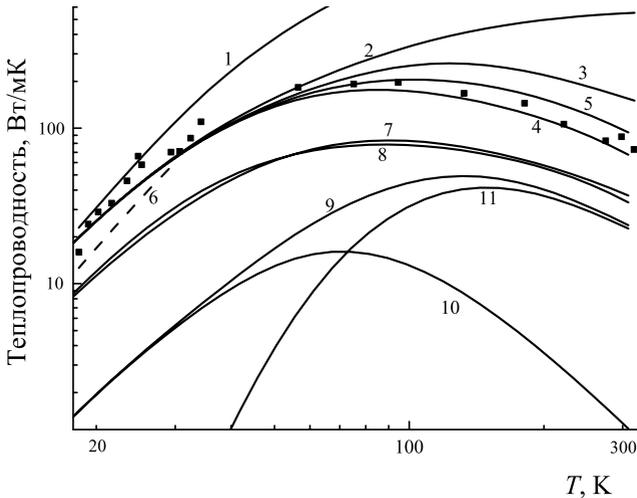


Рис. 6.9. Температурные зависимости теплопроводности кремниевой пленки с $D = 0.42$ мкм, $L = 8$ мкм, $W = 100D$ и $P = 0.29$ для направления градиента температуры $[100]$ и ориентации пленки $\{100\}$ при включении различных механизмов рассеяния фононов: кривая 1 – режим граничного рассеяния $\nu = \tilde{\nu}_{B\{100\}}^{\lambda\{100\}}$, кривая 2 – $\nu = \tilde{\nu}_{B\{100\}}^{\lambda\{100\}} + \nu_{iso}$, кривая 3 – $\nu = \tilde{\nu}_{B\{100\}}^{\lambda\{100\}} + \nu_{iso} + \nu_U$, кривая 4 – вклад диффузионного движения, кривая 5 – полная теплопроводность, кривая 6 – режим граничного рассеяния для $P = 0$. 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 [6,7]

теплопроводности пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм мы фиксируем ориентацию плоскости пленки $\{J\} = \{100\}$ и параметры зеркальности соответственно $P_{\{100\}} = 0.48$ и 0.29 . Как видно из рисунка 6.9, при температурах выше 50 К значительную роль в теплосопrotвлении играют ан-

гармонические процессы рассеяния. При анализе теплопроводности кремниевых пленок мы используем те же самые параметры ангармонических процессов рассеяния, что и для нанопроводов (см. таблицу 6.1). 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 6.9, при $T < 54$ К доминирующий вклад в теплопроводность вносит медленная поперечная мода (см. рис. 6.9, 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. 1.5) 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. 6.9, кривая 8). Поэтому во всем интервале температур от 54 до 350 К доминирующий вклад в теплопроводность вносит быстрая поперечная мода t_1 . Для поперечных фононов диффузионный вклад в теплопроводность во всем интервале температур значительно превосходит вклад дрейфового движения.

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. 6.9, 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. 6.9, 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 6.9, учет дрейфового движения

продольных фононов позволяет согласовать результаты расчета теплопроводности пленок с экспериментальными данными [6,7].

На рисунке 6.10 приведены температурные зависимости теплопроводности для пленок различной толщины 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 граничное рассеяние обеспечивает 50% полного теплосопrotivления. 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,

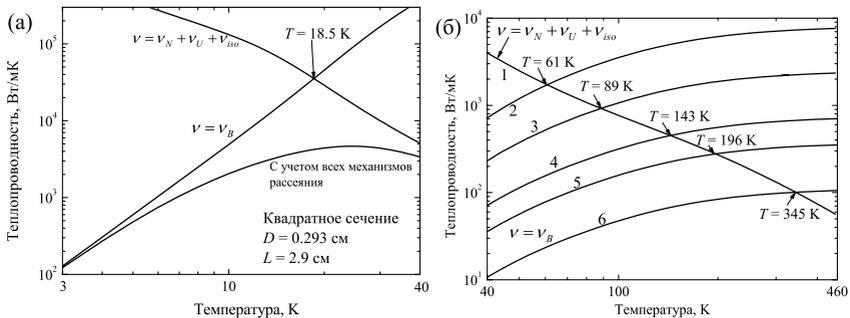


Рис. 6.10. Температурные зависимости теплопроводности (а) – для объемных образцов [19], (б) – для пленок с ориентацией $\{100\}$: для объемных механизмов релаксации – кривая 1, и для граничного рассеяния в пленках с параметрами: $D=1.6$ мкм, $L=8$ мкм и $P=0.48$ – кривая 2; $D=0.42$ мкм, $L=8$ мкм и $P=0.29$ – 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

а для $D = 0.02$ мкм при $P = 0$ имеем $T_{BV} = 345$ К. Как видно из рисунка, для объёмных материалов температуры перехода T_{BV} существенно меньше. 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, при комнатных температурах граничное рассеяние фононов играет существенную роль в теплопроводности достаточно тонких пленок.

Сравним температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с круглым и квадратным сечениями. В разделе 2.3 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 [4] и результатами, полученными в [23,113]

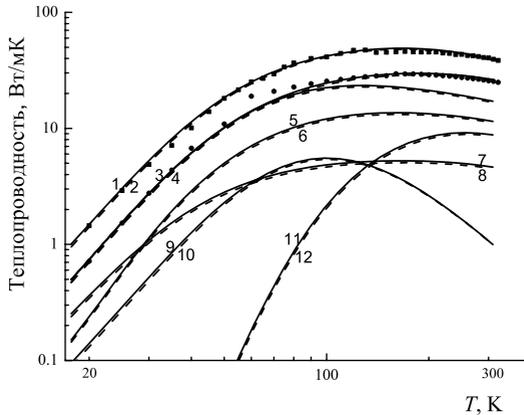


Рис. 6.11. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с круглым (сплошные кривые 1,3) и квадратным (пунктирные кривые 2,4) поперечными сечениями, равными по площади для $2R_1 = 115$ нм (кривые 1,2) и $2R_2 = 56$ нм (кривые 3,4), также вкладов в теплопроводность для нанопроводов с $2R_2 = 56$ 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 [4]

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 (см. рис. 6.11). Параметр зеркальности отражения для нанопроводов

взяты одинаковым $P = 0.15$. Как видно из рисунка 6.11, результаты расчетов для нанопроводов квадратным и круглым сечениями [23,113] хорошо согласуются друг с другом и с экспериментальными данными [4]: при $T = 20$ К отличие двух расчетов составляет 3.7%, а при $T = 300$ К – 0.6%, что значительно меньше погрешности эксперимента. Причем, хорошо согласуются не только полные теплопроводности, но и вклады всех колебательных мод, а также дрейфового и диффузионного движения фононов (см. рис. 6.11). Эти результаты свидетельствуют, что аналитические решения 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.

6.2.2. 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, связанной с пленкой, компоненты групповой скорости фононов V_{g1}^λ , V_{g2}^λ и V_{g3}^λ для рассматриваемых случаев определены формулами (4.4).

При $\mu = 1$ или $W = D$ мы имеем нанопровод с квадратным сечением. Поэтому развитая нами аналитическая теория дает нам уникальную возможность исследовать изменение анизотропии теплопроводности при переходе от нанопровода ($\mu = 1$) к достаточно широким пленкам ($\mu = 100$) при фиксированной температуре. На рисунке 6.12 приведены такие зависимости для двух температур 20 и 320 К и трех ориентаций плоскостей пленок $\{J\} = \{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$. Рассмотрим особенности фононного транспорта в кремниевых нанопроводах с квадратным сечением. В отличие от нанопроводов с круглым сечением величины тепло-

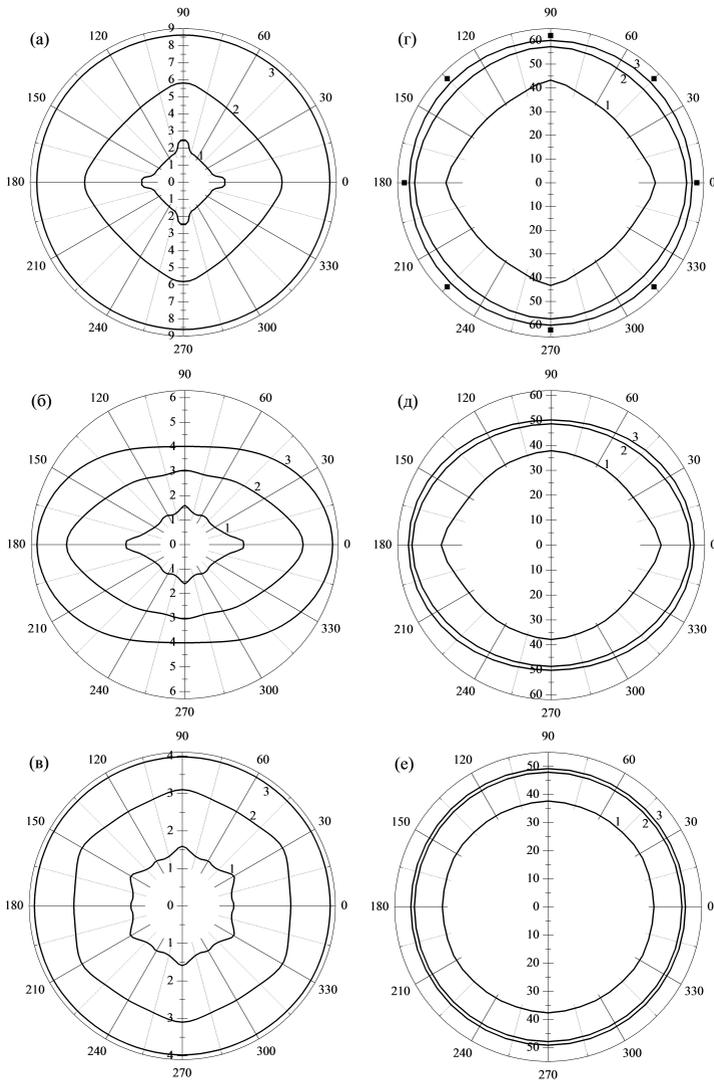


Рис. 6.12. Угловые зависимости теплопроводности $\kappa(\psi)$ (Вт/мК) кремниевых пленок с $D = 0.10$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0.14$ для двух температур 20 К (а,б,в) и 320 К (г,д,е) для трех ориентаций плоскостей пленок $\{J\} = \{100\}$ (а,г), $\{110\}$ (б,д) и $\{111\}$ (в,е), рассчитанные для трех значений параметра μ : кривые 1 - $\mu = 1$, кривые 2 - $\mu = 10$, кривые 3 - $\mu = 100$. Символы ■ – экспериментальные данные [5]

проводности нанопроводов квадратным сечением зависит от ориентации боковых граней. Однако эта зависимость является слабой. Анализ случаев, когда ось нанопровода совпадает с осью вращения и направлениями теплового потока $[111]$ и $[100]$ показал, что анизотропия теплопроводности, обусловленная изменением ориентаций боковых граней нанопровода составляет менее 1%. В противоположность этому изменение направления теплового потока относительно осей кристалла приводит к значительной анизотропии теплопроводности нанопроводов. В этом случае для нанопроводов квадратным и круглым сечениями при равенстве площадей поперечных сечений результаты расчета теплопроводности хорошо согласуются друг с другом (см. рис. 6.11). Подробный анализ угловых зависимостей теплопроводности кремниевых нанопроводов приведен в разделе 6.1.2, в котором показано, что анизотропия теплопроводности обусловлена фокусировкой и дефокусировкой фононов.

В противоположность нанопроводам, анизотропия теплопроводности достаточно широких пленок обусловлена, главным образом, её ориентационной зависимостью. Как видно из рисунков 6.12, 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 $\mu = 100$ ($L = 100D$) она становится изотропной, хотя при $\mu = 10$ небольшая анизотропия еще остается (см. рис. 6.12 а,б): 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 6.2).

Следует отметить, что максимальные значения теплопроводности достигаются для ориентации $\{100\}$, а минимальные – для ориентации

$\{111\}$ (см. рис. 6.12а,в). Для достаточно широких пленок Si ($\mu = 100$) при $T = 20$ К и $P = 0.14$ отношение теплопроводностей $\kappa_{[J(\varphi)]}^{\{100\}}(100)/\kappa_{[J(\varphi)]}^{\{111\}}(100)$ для этих ориентаций составляет 2.2 (см. таблицу 6.2). 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

Таблица 6.2

Отношения теплопроводностей кремниевых нанопленок 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 | 1.50 | 1.72 | 1.01 |
| | 10 | 1.20 | 1.60 | 1.50 | 1.6 |
| | 100 | 1.00 | 1.50 | 1.3 | 2.2 |
| 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 |

(см. таблицу 6.2). 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 2.2, то при $T = 320$ К оно уменьшается до 1.20 (см. таблицу 6.2). При этом вклад граничного рассеяния в теплосоппротивление нанопленки с $D = 0.1$ мкм при комнатной температуре составляет 17%. Для плоскости $\{110\}$ угловые зависимости $\kappa_{[J(\varphi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в достаточно широких пленках принимают эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления $[100]$. Для этой ориентации при $T = 20$ К и $\mu = 1, 10, 100$ отношения значений теплопроводности $\kappa_{[100]}^{\{110\}}(\mu)/\kappa_{[110]}^{\{110\}}(\mu)$ составляет 1.50, 1.60 и 1.50, 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 изменяются 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 $\{111\}$.

6.3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты шестой главы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Использование вычисленных нами времен релаксации фононов на границах позволило в трехмодовой модели Каллавея адекватно описать температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов диаметром более 50 нм и пленок толщиной более 20 нм.

2. Определены 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. Показано, что при диффузном рассеянии фононов на границах пленок Si максимальной теплопроводностью обладают пленки с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью - пленки с ориентацией $\{111\}$.

3. 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.

4. Исследование роли граничного рассеяния показало, что при комнатных температурах вклад граничного рассеяния в теплосопrotivление достигает 60% для нанопроводов с диаметром 56 нм и для пленок с толщиной 20 нм.

7. ПЕРСПЕКТИВЫ ДАЛЬНЕЙШИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В настоящее время теория фононного транспорта в объемных и наноразмерных монокристаллических образцах все еще далека от завершения, и ряд важных проблем ещё не решен. Одной из таких проблем является влияние анизотропии упругой энергии на распространение фононов, их фокусировку и теплопроводность монокристаллических образцов. Основным недостатком существующих теорий при описании температурных зависимостей теплопроводности является необходимость введения значительного числа подгоночных параметров как для граничного рассеяния фононов, так и для нормальных процессов фонон-фононного рассеяния и процессов переброса (см., например, [9,35,36,85]). Одним из достижений изложенной выше теории является аналитическое решение задачи о диффузном рассеянии фононов на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями и определение соответствующих времен релаксации фононов. Это позволило избавиться от подгоночных параметров в граничном рассеянии фононов, учитывающих различные направления теплового потока или геометрические параметры образцов. Нами показано, что использование развитого в работе [22] метода учета фокусировки фононов и аналитических решений для времен релаксации фононов на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями позволило адекватно описать температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния [19] для всех направлений градиента температур и ориентаций боковых граней образцов. Причем, в интервале от 3 до 15 К, когда доминирует рассеяние на границах и изотопическом беспорядке, теория [20-22] количественно описывает температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния для всех образцов, исследованных в работе [19], без использования подгоночных параметров. При увеличении температуры возрастает вклад ангармонических процессов рассеяния и расхождение результатов расчета и данных эксперимента увеличиваются. Максимальное различие рассчитанных и экспериментальных значений [19] имеет место в окрестности максимума теплопроводности, когда вклады в теплосоппротивление от граничного рассеяния и объемных механизмов релаксации сравниваются. Хотя отклонение от

экспериментальных данных в окрестности максимума не велико: в направлениях [001] рассчитанные значения оказываются выше измеренных на 5%, а в [111] ниже экспериментальных величин на 6%, однако результаты расчета дают значение анизотропии в три раза больше, чем следует из эксперимента. При более высоких температурах анизотропия теплопроводности уменьшается медленнее, чем следует из эксперимента. Как уже отмечалось, возможной причиной этого расхождения является использование правила Маттиссена при переходе от граничного рассеяния к объемному. Связано это с тем, что граничное рассеяние фононов происходит вблизи поверхности образца, а объёмные процессы происходят равномерно по всему объёму. Поэтому скорости релаксации в этих механизмах рассеяния не могут аддитивно складываться, как это следует из правила Маттиссена. Очевидно, что максимальное отклонение от правила Маттиссена будет иметь место в условиях, когда скорости релаксации фононов в объёмных механизмах и граничном рассеянии сравниваются. Херринг [38,105], анализируя роль низкоэнергетических фононов в теплопроводности и термоэдс монокристаллических полупроводников, также указал на слабость правила Маттиссена при температурах вблизи максимума теплопроводности. Для того, чтобы корректно учесть совместное действие граничного и объёмных механизмов рассеяния фононов, необходимо решить кинетическое уравнение Больцмана при учете неоднородного распределения теплового потока по поперечному сечению образца. При учете фокусировки фононов эта задача является актуальной, но достаточно сложной. Она требует отдельного рассмотрения.

Поэтому одним из перспективных направлений дальнейшего анализа фононного транспорта в упруго анизотропных пленках и нанопроводах является исследование влияния фокусировки фононов на конкуренцию граничного и объёмных механизмов релаксации фононов методом кинетического уравнения Больцмана (КУБ). Результаты, полученные для теплопроводности объёмных материалов и наноструктур, в методе КУБ необходимо сравнить с результатами работ [20-24,27, 69-71,106], найденными в рамках феноменологического метода Казимира–МакКарди [13,19]. Это позволит определить пределы применимости феноменологического метода для анализа фононного транспорта в наноструктурах с различной геометрией. Проверить обоснованность использования правила Маттиссена для граничного и объёмных механизмов рассеяния при исследовании фононного транспорта в наноструктурах как вдали, так и в окрестности температуры перехода от

граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации. Проанализировать зависимости теплопроводности наноструктур от геометрических параметров, направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок относительно осей кристалла. Изучить роль интерференции граничного и объемных механизмов рассеяния при исследовании фононного транспорта в наноструктурах. Применить развитую теорию к анализу теплопроводности в изотопически высокообогащенных кристаллах Ge, Si и алмаза.

Следует отметить, что проблема фокусировки фононов не ограничивается влиянием на фононный транспорт в диэлектрических кристаллах. Она является актуальной при исследовании кинетических явлений в металлах и полупроводниках, обусловленных увлечением электронов фононами и их взаимным увлечением. При достаточно низких температурах, когда электрон-фононное взаимодействие становится доминирующим механизмом релаксации электронов (а для взаимного увлечения оно должно доминировать и для фононов), то такие кинетические коэффициенты как электропроводность и термоэдс увлечения становятся зависящими от механизма релаксации импульса фононов [67,114]. При достаточно низких температурах основным механизмом релаксации фононов является диффузное рассеяние на границах образца [67, 114]. Естественно, что фокусировка фононов, приводящая к анизотропии теплопроводности в режиме кнудсеновского течения фононного газа, должна приводить также к анизотропии термоэдс увлечения. Ранее при исследовании термоэдс увлечения в полупроводниках для фононов использовалась, как правило, модель изотропной среды (см., например, [67,114]), поэтому эффекты, обусловленные влиянием анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение не могли быть рассмотрены. Хорошо известно [67,114], что в модели изотропной среды электроны могут взаимодействовать через деформационный потенциал только с продольными фононами. Однако в упруго анизотропных кристаллах распространяются квазипродольные и квазипоперечные фононы. Причем, последние имеют отличную от нуля продольную компоненту и могут через деформационный потенциал также взаимодействовать с электронами. Анализ упругих волн в кубических кристаллах показал, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах мал, и им можно пренебречь [44] Вклады продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым: максимальное значение его для медленной поперечной моды составляет 13, 14 и 16.5% для кристаллов HgSe:Fe, Si и Ge и

(16% и 17% для InSb и GaAs), для кристалла KCl он достигает 27% [44]. Поэтому представляет интерес рассчитать и проанализировать вклады квазипродольных и квазипоперечных фононов в электрон-фононное увлечение и термоэлектрические эффекты в полупроводниковых кристаллах и наноструктурах на их основе. Более того, вклад поперечных мод в теплопроводность Si и Ge при низких температурах в направлениях [100] превышает 90% как за счет большей плотности фононных состояний, так и за счет влияния фокусировки фононов на длины свободного пробега фононов. Поэтому одной из интересных для теории и технических приложений задач является исследование влияния анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение и термоэлектрические явления в полупроводниковых кристаллах и наноструктурах на их основе при низких температурах.

Первый шаг в этом направлении сделан в работе [115], в которой развит метод расчета и исследовано влияние анизотропии упругих свойств на электрон-фононное увлечение и термоэлектрические явления в бесщелевом полупроводнике HgSe:Fe с вырожденной статистикой носителей тока. Проанализировано влияние фокусировки фононов на зависимости термоэдс от геометрических параметров и направлений теплового потока относительно осей кристалла. Определены кристаллографические направления, обеспечивающие максимальные и минимальные значения термоэдс. Проанализирована роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения в кристаллах HgSe:Fe при низких температурах. Показано, что вклад продольных фононов в термоэдс увлечения, как и их длина свободного пробега, имеют максимум в направлении фокусировки [111], а минимум - в направлении дефокусировки [001]. Вклад медленной квазипоперечной моды достигает максимума в направлении фокусировки [001] и в достаточно длинных образцах может превосходить вклад квазипродольных фононов. Поэтому при анализе термоэдс увлечения в упруго анизотропных кристаллах необходимо учитывать оба вклада.

В свете полученных в работе [115] результатов представляется интересным проанализировать влияние фокусировки фононов на электрон-фононное увлечение в монокристаллических нанопроводах, пленках и гетероструктурах.

Монография написана по теме «Спин» государственного задания ФАНО России при поддержке программы призеридума РАН (проект №32-1.1.3.5) и УрО РАН (проект №18-10-2-37).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cahill D.G., Ford W.K., Goodson K.E., Mahan G.D., Majumdar A., Maris H.J., Merlin R., Phillpot S.R. Nanoscale thermal transport // J. Appl. Phys. 2003. V. 93, № 2. P. 793–818.
2. McConnell A. D. and Goodson K. E. Nanoscale thermal transport // Ann. Rev. on Heat Transfer. 2005. V. 14, P. 129-168.
3. Cahill D. G., Braun P. V., Chen G., Clarke D. R., Fan S., Goodson K. E., Keblinski P., King W. P., Mahan G. D., Majumdar A., Maris H.J., Phillpot S. R., Pop E., Shi L. Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012 // Applied Physics Reviews. 2014. V. 1. № 1. P. 011305.
4. Li D., Wu Y., Kim P., Shi L., Yang P., Majumdar A. Thermal conductivity of individual silicon nanowires // Applied Physics Letters. 2003. V. 83, P. 2934-2936.
5. Liu W. and Asheghi M. Phonon–boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers // Applied Physics Letters. 2004. V. 84. P. 3819-3821.
6. Asheghi M., Touzelbaev M. N., Goodson K. E., Leung Y. K., Wong, S. S. Temperature-Dependent Thermal Conductivity of Single-Crystal Silicon Layers in SOI Substrates // Journal of Heat Transfer. 1998. V. 120. P. 30-36.
7. Asheghi M., Leung Y. K., Wong S. S., Goodson K. E. Phonon-boundary scattering in thin silicon layers // Applied Physics Letters. 1997. V. 71. P. 1798-1800.
8. Займан Дж. Электроны и фононы. ИЛ Москва, 1962. 488 с.
9. Могилевский Б. М., Чудновский А. Ф. Теплопроводность полупроводников. М.: Наука, 1972. 536 с.
10. Силлин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. М.: Наука, 1971. 332 с.
11. Девуен М. Течение и теплообмен разреженных газов. Пер. с англ. М.: Изд-во иностранной литературы, 1962. 188 с.
12. Knudsen M. Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren // Annalen der Physik. 1909. V. 333, № 1. P. 75–130.
13. Casimir H. B. G. Note on the conduction of heat in crystals // Physica. 1938. V. 5. P. 495-500.
14. Berman R., Simon F. E. and Ziman J. M. The Thermal Conductivity of Diamond at Low Temperatures // Proc. R. Soc. Lond. 1953. V. A 220. P. 171.

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

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

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

18. *Wolfe J. P.* Imaging Phonons: Acoustic Wave Propagation in Solids. Cambridge University Press, New York. 1998. 411 p.

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

20. *Кулеев И.И., Кулеев И.Г., Бахарев С.М., Инюшкин А. В.* Времена релаксации и длины свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния для монокристаллов кремния // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. С. 24-35.

21. *Kuleyev I.I., Kuleyev I.G., Bakharev S.M., Inyushkin A.V.* Features of phonon transport in silicon rods and thin plates in the boundary scattering regime. The effect of phonon focusing at low temperatures // Physica B. 2013. V. 416. P. 81-87.

22. *Kuleyev I.I., Kuleyev I.G., Bakharev S.M., Inyushkin A.V.* Effect of phonon focusing on the temperature dependence of thermal conductivity of silicon // Phys. Stat. Sol. B. 2014. V. 251. № 5. P. 991-1000.

23. *Кулеев И. Г., Кулеев И. И., Бахарев С. М.* Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2014. Т. 145. №. 2. С. 292-305.

24. *Кулеев И. И., Бахарев С. М., Кулеев И. Г., Устинов В. В.* Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопленок // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 147. № 4. С. 736-749.

25. *Maris H. J., Tamura S.* Heat flow in nanostructures in the Casimir regime // Physical Review B. 2012. Т. 85. №. 5. С. 054304.

26. *Mingo N.* Calculation of Si nanowire thermal conductivity using complete phonon dispersion relations // Physical Review B. 2003. Т. 68. №. 11. С. 113308.

27. *Кулеев И. Г., Кулеев И. И., Бахарев С. М.* Анизотропия теплопроводности монокристаллических нанопленок и нанопроводов при низких температурах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2014. Т. 146. №. 3. С. 525-539.

28. *Aksamija Z. and Knezevic I.* Anisotropy and boundary scattering in the lattice thermal conductivity of silicon nanomembranes // Phys. Rev. B. 2010. V. 82. P. 045319.

29. *Turney J. E., McGaughey A. J. H. and Amon C. H.* In-plane phonon transport in thin films // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. P. 024317.

30. *Fuchs K.* The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1938. V. 34. P. 100–108.

31. *Sondheimer E.H.* The mean free path of electrons in metals // Advances in Physics. 1952. V. 1, № 1. P. 1–42.

32. *Zaitlin, M. P.* Boundary scattering of phonons in noncrystalline materials // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. P. 4487–4492.

33. *Li W., Mingo N., Lindsay L., Broido D. A., Stewart D. A., Katcho N. A.* Thermal conductivity of diamond nanowires from first principles // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 195436.

34. *Guo J., Wen B., Melnik R., Yao S., Li T.* Geometry and temperature dependent thermal conductivity of diamond nanowires: A non-equilibrium molecular dynamics study // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2010. V. 43. №. 1. P. 155-160.

35. *Берман Р.* Теплопроводность твёрдых тел. Мир, 1979. С. 286.

36. *Гуревич В.Л.* Кинетика фононных систем. М.: Наука, 1980. С. 400.

37. *Asheghi M., Kurabayashi K., Kasnavi R., Goodson K.* Thermal conduction in doped single-crystal silicon films // Journal of Applied Physics. 2002. V. 91. P. 5079-5088.

38. *Herring C.* Role of Low-Energy Phonons in Thermal Conduction // Phys. Rev. 1954. V. 95. P. 954-965.

39. *Кулеев И. Г., Кулеев И. И., Бахарев С. М.* Влияние дисперсии и затухания состояний тепловых фононов на поглощение продольного ультразвука в кристаллах Ge // Физика твердого тела. 2011. Т. 53. № 8. С. 1564-1575.

40. *Kuleyev I. G., Kuleyev I. I., Arapova I. Yu.* Interaction of collinear and noncollinear phonons in anharmonic scattering processes and their role

in ultrasound absorption of fast quasi-transverse modes in cubic crystals // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2010. V. 22. № 9. P. 095403.

41. *Лейбфрид Г.* Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963. 312 с.

42. *Федоров Ф. И.* Теория упругих волн в кристаллах. М.: Наука, 1965. 388 с.

43. *Киттель Ч.* Введение в физику твёрдого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.

44. *Кулеев И. Г., Кулеев И. И.* Упругие волны в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка // *Физика твердого тела*. 2007. Т. 49, 3. С. 422-429.

45. *Taylor B.* Focusing of Phonons in Crystalline Solids due to Elastic // *Phys. Rev. B*. 1971. V. 3. P. 1462-1472.

46. *Truell R., Elbaum C., Chick B. B.* Ultrasonic Methods in Solid State Physics. New York and London: Academic Press, 1969. 464 p.

47. *Такер Дж., Рэмpton В.* Гиперзвук в физике твердого тела. М.: Мир, 1975. 272 с.

48. *Voigt W.* Lehrbuch der Kristalphysik. Springer-Verlag, 2014. 979 p.

49. *Simons S.* The absorption of very high frequency sound in dielectric solids // *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. 1957. 7. V. 53. P. 702-716.

50. *Yogurtcu Y. K., Miller A. J., Saunders G. A.* Elastic behaviour of YAG under pressure // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1980. V. 13. № 36. P. 6585.

51. *Overton W.C., Swim R.T.* The Adiabatic Elastic Constants of Rock Salt // *Phys. Rev.* 1951. V. 84. P. 758-762.

52. *McSkimin H. J., Bond W. L.* Elastic Moduli of Diamond // *Phys. Rev.* 1957. V. 105. P. 116-121.

53. *McSkimin H. J., Andreatch P.* Elastic Moduli of Silicon vs Hydrostatic Pressure at 25.0 C and 195.8 C // *Journal of Applied Physics*. 1964. V. 35, № 7. P. 2161-2165.

54. *Huffman D. R., Norwood M. H.* Specific Heat and Elastic Constants of Calcium Fluoride at Low Temperatures // *Phys. Rev.* 1960. V. 117. P. 709-711.

55. *Galt J. K.* Mechanical Properties of NaCl, KBr, KCl // *Phys. Rev.* 1948. V. 73. P. 1460-1462.

56. *Drabble J.R., Brammer A.J.* Third order elastic constants of gallium arsenide // *Solid State Communications*. 1966. V. 4. № 9. P. 467-468.
57. *Briscoe C. V., Squire C. F.* Elastic Constants of LiF from 4.2 K to 300 K by Ultrasonic Methods // *Phys. Rev.* 1957. V. 106. P. 1175-1177.
58. *Wright A. F.* Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN // *Journal of Applied Physics*. 1997. V. 82. №. 6. P. 2833-2839.
59. *Lehoczky A., Nelson D. A., Whitsett C. R.* Elastic Constants of Mercury Selenide // *Phys. Rev.* 1969. V. 188. P. 1069-1073.
60. *Nilsson G., Nelin G.* Phonon dispersion relations in Ge at 80 K // *Physical Review B*. 1971. V. 3. №. 2. P. 364.
61. *Nilsson G., Nelin G.* Study of the Homology between Silicon and Germanium by Thermal-Neutron Spectrometry // *Phys. Rev. B*. 1972. V. 6. P. 3777-3786.
62. *Bilz H., Kress W.* Phonon dispersion relations in insulators. New York: Springer Ser. in Solid-State Sci. 10, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, 1979. 241 p.
63. *Кулеев И.И., Кулеев И.Г., Бахарев С.М., Инюшкин А. В.* Влияние дисперсии на фокусировку фононов и анизотропию теплопроводности монокристаллов кремния в режиме граничного рассеяния // *Физика твердого тела*. 2013. Т. 55. С. 1441-1450.
64. *Девярых Г.Г., Гусев А.В., Гибин А.М., Тимофеев О.В.* Теплоемкость высокочистого кремния // *Неорганические материалы*. 1997. Т. 33. № 12. С. 1425–1428.
65. *Flubacher P., Leadbetter A. J., Morrison J. A.* The heat capacity of pure silicon and germanium and properties of their vibrational frequency spectra // *Philosophical Magazine*. 1959. V. 4, 39. P. 273–294.
66. *Ziman J. M.* *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*. Oxford: Oxford University Press, 1962. 554 p.
67. *Ансельм А. И.* Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.
68. *Miller G. F., Musgrave M. J. P.* On the propagation of elastic waves in aeolotropic media. III. Media of cubic symmetry // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1956. V. 236. №. 1206. P. 352-383; *Musgrave M. J. P., Proc. Roy. Soc.* 1954. V. A226, № 1206. P. 339-356.
69. *Кулеев И. И., Бахарев С. М., Кулеев И. Г., Устинов В. В.* Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в

монокристаллических нанопроводах из материалов спинтроники // Физика металлов и металловедение. 2017. Т. 118. № 1. С. 12-22.

70. *Кулеев И. И., Бахарев С. М., Кулеев И. Г., Устинов В. В.* Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в монокристаллических нанопленках из материалов спинтроники // Физика металлов и металловедение. 2017. Т. 118. № 4. С. 332-344.

71. *Kuleyev I.I., Bakharev S. M., Kuleyev I. G., Ustinov V. V.* The influence of phonon focusing on density of states and the Knudsen phonon gas flow in nanowires with different types of anisotropy of elastic energy // Phys. stat. sol. C. 2017. V. 14. № 3-4. P. 1600263.

72. *Every A. G.* Formation of phonon-focusing caustics in crystals // Physical Review B. 1986. – V. 34. №. 4. P. 2852.

73. *Lax M., Narayanamurti V.* Phonon magnification and the gaussian curvature of the slowness surface in anisotropic media: detector shape effects with application to GaAs // Physical Review B. 1980. V. 22. №. 10. P. 4876-4897.

74. *Shields J.A., Wolfe J.P. and Tamura S.I.* Channeling of acoustic phonons in silicon: the polarization dependence in elastic scattering // Z. Phys. B. 1989. V. 76. P. 295-301.

75. *Jasiukiewicz Cz., Paszkiewicz T., Lehmann D.* Phonon focussing patterns: Calculation of response of finite area detectors to pulsed ballistic beams of dispersive and dispersionless phonons // Z. Phys. B. 1994. V. 96. P. 213-222.

76. *de Klerk J. and Musgrave M. J. P.* Internal Conical Refraction of Transverse Elastic Waves in Cubic Crystal // Proceedings of the Physical Society. Section B. 1955. V. 68. P. 81.

77. *Waterman P. C.* Orientation Dependence of Elastic Waves in Single Crystals // Phys. Rev. 1959. V. 113. P. 1240-1253.

78. *Власов К.Б., Ринкевич А.Б.* Внутренняя коническая рефракция упругих волн // Акустический журнал. 1995. Т. 41. №1. С. 67-71.

79. *Held E., Klein W., Huebener R.P.* Characterization of single-crystalline GaAs by imaging with ballistic phonons // Zeitschrift fur Physik B: Condensed Matter. 1989. V. 75. P. 17-29.

80. *Northrop G. A., Wolfe J. P.* Ballistic phonon imaging in germanium // Physical Review B. 1980. V. 22. №. 12. P. 6196.

81. *Philip J., Viswanathan K. S.* Phonon magnification in cubic crystals // Physical Review B. 1978. V. 17. №. 12. P. 4969.

82. *Every A. G.* Ballistic phonons and the shape of the ray surface in cubic crystals // *Physical Review B*. 1981. V. 24. №. 6. P. 3456.
83. *Погорелов А. В.* Дифференциальная геометрия (6-е издание). М.: Наука, 1974. 176 с.
84. *Jasiukiewicz C., Paszkiewicz T.* Phonon Images of Crystals for Different Sources // *Acta physica polonica series A*. 1993. V. 84. P. 459.
85. *Carruthers P.* Theory of Thermal Conductivity of Solids at Low Temperatures // *Rev. Mod. Phys.* 1961. V. 33. P. 92–138.
86. *Joshi Y. P.* Effect of phonon focussing on thermal conductivity of silicon // *Pramana*. 1982. V. 18. P. 461–472.
87. *Harrison J. P., Pendry J. P.* Thermal Conductivity of Cerium Magnesium Nitrate // *Physical Review B*. 1973. V. 7. №. 8. P. 3902.
88. *Lundt H., Kerstan M., Huber A., Hahn P. O.* Subsurface damage of abraded silicon wafers // *Semiconductor Silicon/1994, Proceedings of the 7th International Symposium on Silicon Materials Science and Technology*. – The Electrochemical Society. 1994. P. 218-224.
89. *Драбл Дж., Голдсмит Г.* Теплопроводность полупроводников. М.: Издательство иностранной литературы, 1963. 266 с.
90. *Uma S., McConnell A., Asheghi M., Kurabayashi K., Goodson K.* Temperature-dependent thermal conductivity of undoped polycrystalline silicon layers // *International Journal of Thermophysics*. 2001. V. 22. P. 605-616.
91. *Callaway J.* Model for lattice thermal conductivity at low temperatures // *Physical Review*. 1959. V 113. №. 4. P. 1046.
92. *Krumhansl J. A.* Thermal conductivity of insulating crystals in the presence of normal processes // *Proceedings of the Physical Society*. 1965. V. 85. №. 5. P. 921.
93. *Armstrong B. H.* N processes, the relaxation-time approximation, and lattice thermal conductivity // *Phys. Rev B*. 1985. V. 32. №. 6. P. 3381-3390.
94. *Кулеев И.Г., Кулеев И.И.* Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и теплопроводность кристаллов германия с изотопическим беспорядком // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2001. Т. 120. С. 649; Влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на максимальные величины теплопроводности изотопически чистых кристаллов кремния // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2002. Т. 122. С. 558.

95. *Asen-Palmer M., Bartkowski K., Gmelin E., Cardona M., Zhernov A. P., Inyushkin A. V., Taldenkov A. N., Ozhogin V. I., Itoh K. M., Haller E. E.* Thermal conductivity of germanium crystals with different isotopic compositions // *Physical review B*. 1997. V. 56. №. 15. P. 9431.

96. *Жернов А. П., Инюшкин А. В.* Влияние композиции изотопов на фононные моды. Статические атомные смещения в кристаллах // *Успехи физических наук*. 2001. Т. 171. №. 8. С. 827-854; Кинетические коэффициенты в кристаллах с изотопическим беспорядком // *Успехи физических наук*. 2002. Т. 172. №. 5. С. 573-599.

97. *Holland M. G.* Analysis of lattice thermal conductivity // *Physical Review*. 1963. V. 132. №. 6. С. 2461.

98. *Landau L., Rumer G.* Absorption of sound in solids // *Phys. Z. Sowjetunion*. 1937. V. 11. P. 18–25.

99. *Simons S.* On the Mutual Interaction of Parallel Phonons // *Proc. Phys. Soc.* 1963. V. 82. № 3. P. 401.

100. *Kuleyev I. G., Kuleyev I. I., Arapova I. Yu.* Anharmonic processes of scattering and absorption of slow quasi-transverse modes in cubic crystals with positive and negative anisotropies of second-order elastic moduli // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2008. V. 20. P. 465201; Interaction of collinear and noncollinear phonons in anharmonic scattering processes and their role in ultrasound absorption of fast quasi-transverse modes in cubic crystals // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2010. V. 22. P. 0945403.

101. *Klemens P. G.* The scattering of low-frequency lattice waves by static imperfections // *Proceedings of the Physical Society. Section A*. 1955. V. 68. №. 12. P. 1113.

102. *Tamura S. I.* Isotope scattering of dispersive phonons in Ge // *Physical Review B*. 1983. V. 27. №. 2. P. 858-866.

103. *Жернов А. П., Инюшкин А. В.* Изотопические эффекты в твердых телах. М.: Российский научный центр "Курчатовский институт", 2001.

104. *Kuleyev I. G., Kuleyev I. I., Arapova I. Y.* 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 // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2007. V. 19. №. 40. P. 406216.

105. *Herring C.* Theory of the Thermoelectric Power of Semiconductors // *Phys. Rev.* 1954. V. 96. P. 1163–1187.

106. *Kuleyev I.I., Kuleyev I.G., Bakharev S.M.* Phonon focusing and features of phonon transport in the silicon nanofilms and nanowires at low temperatures // *Phys. Stat. Sol. B.* 2015. V. 252. P. 323-332.

107. *Smoluchowski M.* Zur kinetischen Theorie der Transpiration und Diffusion verdünnter Gase // *Annalen der Physik.* 1910. V. 338, № 16. P. 1559-1570.

108. *Zhu Y. F., Lian J. S., Jiang Q.* Re-examination of Casimir limit for phonon traveling in semiconductor nanostructures // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V. 92. P. 113101.

109. *Кулеев И.И.* Анизотропия длин свободного пробега фононов в монокристаллических пленках Ge, Si, алмаза при низких температурах // *Физика твердого тела.* 2017. Т. 59. С. 668-678.

110. *Kruglyak Y.* Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics // *Journal of Nanoscience.* 2014. V. 2014. P. 1-15.

111. *O'Mara W., Herring R. B., Hunt L. P.* Handbook of Semiconductor Silicon Technology. 1 edition. William Andrew, 1990. 795 p.

112. *Soffer S. B.* Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction // *Journal of Applied Physics.* 1967. V. 38. № 4. P. 1710-1715.

113. *Кулеев И. Г., Кулеев И. И., Бахарев С. М.* Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов // *Известия РАН. Серия физическая.* 2014. Т. 78. № 9. С. 1147–1149.

114. *Аскеров В.М.* Электронные явления переноса в полупроводниках. М.: Наука, 1985. 320 с.

115. *Кулеев И.Г., Кулеев И.И., Бахарев С.М., Устинов В.В.* Фокусировка фононов и электрон-фононное увлечение в полупроводниковых кристаллах с вырожденной статистикой носителей тока // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* 2016. Т. 150. С. 567-585.

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|---|-----|
| Введение | 5 |
| Глава 1. Распространение упругих волн и фокусировка фононов в кубических кристаллах | 14 |
| 1.1. Динамические характеристики фононов в кубических кристаллах в модели анизотропного континуума. | 16 |
| 1.2. Аппроксимация спектра тепловых фононов в кубических кристаллах..... | 35 |
| 1.3. Расчет теплоемкости кристаллов Si и Ge с использованием аппроксимационного спектра фононов. | 44 |
| 1.4. Групповая скорость и особенности распространения фононов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии..... | 47 |
| 1.5. Влияние фокусировки на плотность фононных состояний в кубических кристаллах. | 52 |
| 1.6. Коэффициент усиления потока фононов. | 71 |
| 1.6.1. Аналитический расчет коэффициента усиления потока фононов. | 73 |
| 1.6.2. Анализ угловых зависимостей коэффициента усиления. | 79 |
| 1.7. Заключение. | 91 |
| Глава 2. Времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах монокристаллических образцов конечной длины | 93 |
| 2.1. Релаксация фононов на границах образцов бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями..... | 94 |
| 2.2. Времена релаксация фононов при диффузном рассеянии на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. | 102 |
| 2.3. Анизотропия длин свободного пробега фононов в образцах кремния с круглым и квадратным сечениями при низких температурах..... | 109 |

| | |
|---|-----|
| 2.4. Влияние фокусировки на фононный транспорт в кристаллах кремния с прямоугольным сечением при низких температурах..... | 116 |
| 2.5. Заключение | 121 |

Глава 3. Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности объемных кремниевых образцов..... 122

| | |
|---|-----|
| 3.1. Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и решеточная теплопроводность кубических кристаллов..... | 124 |
| 3.2. Механизмы релаксации и теплопроводность кристаллов кремния..... | 127 |
| 3.3. Анализ температурных зависимостей теплопроводности для образцов кремния с квадратным и прямоугольным сечениями.... | 134 |
| 3.4. Изменение анизотропии теплопроводности в кристаллах кремния с температурой..... | 142 |
| 3.5. Физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности кубических кристаллов..... | 146 |
| 3.6. Заключение | 153 |

Глава 4. Теплопроводность монокристаллических наноструктур с различным типом анизотропии упругой энергии при низких температурах..... 155

| | |
|--|-----|
| 4.1. Длины свободного пробега фононов в монокристаллических наноструктурах..... | 157 |
| 4.2. Влияние геометрических параметров на анизотропию длин свободного пробега фононов в пленках и нанопроводах..... | 161 |
| 4.2.1. Длины Казимира в упруго анизотропных наноструктурах..... | 162 |
| 4.2.2. Зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров в наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии..... | 165 |
| 4.2.3. Зависимости анизотропии теплопроводности от длин монокристаллических пленок..... | 170 |
| 4.3. Влияние фокусировки на плотность состояний и длины свободного пробега фононов в нанопроводах с различным типом анизотропии упругой энергии..... | 174 |

| | |
|---|------------|
| 4.4. Изменение анизотропии теплопроводности при переходе от нанопроводов к квадратным пленкам с различной ориентацией плоскостей..... | 181 |
| 4.5. Заключение..... | 186 |
| Глава 5. Распространение фононов и фононный транспорт в пленках с различным типом анизотропии упругой энергии..... | 188 |
| 5.1. Анизотропия теплопроводности квадратных пленок с различной ориентацией плоскостей..... | 188 |
| 5.2. Особенности теплопроводности в длинных пленках с различным типом анизотропии упругой энергии..... | 195 |
| 5.3. Влияние фокусировки на распространение фононных мод в квадратных пленках с ориентациями плоскостей {100} и {111}.. | 198 |
| 5.4. Заключение..... | 207 |
| Глава 6. Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок и нанопроводов..... | 210 |
| 6.1. Фононный транспорт в кремниевых нанопроводах..... | 211 |
| 6.1.1. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов..... | 211 |
| 6.1.2. Анизотропия теплопроводности кремниевых нанопроводов..... | 218 |
| 6.2. Фононный транспорт в кремниевых пленках..... | 221 |
| 6.2.1. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок..... | 221 |
| 6.2.2. Анизотропия теплопроводности кремниевых пленок..... | 234 |
| 6.3. Заключение..... | 238 |
| 7. Перспективы дальнейших исследований..... | 239 |
| Список литературы..... | 243 |

Научное издание

**Игорь Гайнитдинович Кулеев
Иван Игоревич Кулеев
Сергей Михайлович Бахарев
Владимир Васильевич Устинов**

**ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ И ФОНОННЫЙ
ТРАНСПОРТ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
НАНОСТРУКТУРАХ**

Рекомендовано к изданию Ученым Советом ИФМ УрО РАН

Печатается в авторской редакции
Компьютерная верстка **Ю.Б. Швецов**
Дизайн **Ю.В. Устиновой**

Подписано в печать 15.03.2018 Формат 60×84 1/16.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 16 Уч.-изд. л. 16,2 Тираж 300 экз. Заказ 6321

ООО «Издательство УМЦ УПИ»
620078, Екатеринбург, ул. Гагарина, 35а, оф. 2,
тел. (343) 362-91-16, 369-91-17

Отпечатано в типографии
ООО «Издательство УМЦ УПИ»
620078, г. Екатеринбург, ул. Гагарина, 35а, оф. 2

