

УДК 538.931

© 1992

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ УПРУГОСТИ НА ТЕРМОДИНАМИКУ И КИНЕТИКУ ФОНОНОВ В ВИСМУТЕ

В. Д. Каган, Н. А. Редько

В настоящей работе для вычисления анизотропии термодинамических и кинетических фононных величин висмута использованы известные его данные об упругих модулях. Расчеты теплоемкости и скорости второго звука согласуются с экспериментальными значениями. Вычислена фононная теплопроводность как в условиях близости времени релаксации нормальных и резистивных процессов, так и в условиях их сильного различия, но в предположении, что время релаксации является единой функцией частоты для фононов разных ветвей. Анизотропная теплопроводность вычислена также в казимировском режиме рассеяния фононов на границе и в районе температурного максимума в «грязном» диэлектрике.

1. Кристалл висмута относится к ромбоэдрической системе. Его упругие модули измерены достаточно полно [1]. Как следует из данных этой работы, значения упругих модулей V_i (в единицах 10^{10} дин/см²) изменяются на малую величину при изменении температуры от 300 до 4.2 К: $63.5 < C_{11} < 68.7$, $38.1 < C_{33} < 40.6$, $11.3 < C_{44} < 12.9$, $19.4 < C_{66} < 22.5$, $24.5 < C_{13} < ?$, $7.2 < C_{14} < 8.44$. Частоты упругих волн ω_q с волновым вектором q в кристаллах этой системы определяются из следующего дисперсионного уравнения [2]:

$$\Delta(\omega_q) = \Delta_0 + \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 = 0, \quad (1)$$

где $\Delta_0 = (-\rho\omega^2 + C_{44}q_z^2 + C_{66}q_\perp^2) [(\rho\omega^2)^2 - \rho\omega^2(C_{11}q_\perp^2 + C_{33}q_z^2 + C_{44}q^2) + (C_{11}C_{44}q_\perp^4 + C_{33}C_{44}q_z^4) - (C_{13} + C_{44})^2 q_z^2 q_\perp^2]$,

$$\Delta_1 = 2C_{14}q_x q_z (q_x^2 - 3q_y^2) [(C_{11} - C_{66})(\rho\omega^2 - C_{33}q_z^2 - C_{44}q_\perp^2) + (C_{13} + C_{44})(\rho\omega^2 - C_{44}q_\perp^2 - C_{66}q_\perp^2) + (C_{13} + C_{44})^2 q_z^2],$$

$$\Delta_2 = C_{14}^2 [4q_z^2 q_\perp^2 (\rho\omega^2 - C_{33}q_z^2 - C_{44}q_\perp^2) + q_\perp^4 (\rho\omega^2 - C_{44}q_z^2) + 4q_z^2 q_\perp^4 (C_{13} + C_{44}) - C_{11}q_z^2 (q_y^2 - 3q_x^2)^2 - C_{66}q_x^2 (q_x^2 - 3q_y^2)^2],$$

$$\Delta_3 = 2C_{14}^3 q_x q_z q_\perp^2 (q_x^2 - 3q_y^2).$$

Здесь q_i — компоненты вектора q , $q_\perp^2 = q_x^2 + q_y^2$, $q^2 = q_\perp^2 + q_z^2$, $\rho = 9.8$ г/см³ — плотность висмута. Ось z выбрана вдоль оси симметрии третьего порядка кристалла висмута, а ось x перпендикулярна плоскости симметрии. Получить из этого уравнения аналитические выражения для частот ω_q не представляется возможным. Но видно, что уравнение (1) отличается от гексагонального случая, для которого решение известно [2], наличием упругого модуля C_{14} . Таким образом, пренебрежение модулем C_{14} , который является наименьшим, позволяет найти такие выражения из упрощенного уравнения (1) $\Delta_0(\omega_q) = 0$ [2].

В статье [3] указано, что эти выражения в свою очередь существенно упрощаются в том случае, когда имеет место равенство

$$(C_{11} - C_{44})(C_{33} - C_{44}) = (C_{13} + C_{44})^2. \quad (2)$$

Поскольку в висмуте это равенство выполняется с точностью 10%, автор [3] предложил использовать для висмута модель поперечно-изотропной упругой среды. Приведем выражение частот в этой модели

$$\omega_{iq}^2 = a_i q_1^2 + b_i q_2^2, \quad (3)$$

где $a_1 = b_1 = C_{44}/\rho$, $a_2 = C_{66}/\rho$, $b_2 = C_{44}/\rho$, $a_3 = C_{11}/\rho$, $b_3 = C_{33}/\rho$. В висмуте третья волна обладает наибольшими скоростями по всем направлениям, первая волна — изотропной скоростью, наименьшей по величине, а вторая волна — промежуточным значением скорости, которая только вдоль оси z равна малой скорости первой волны.

Не желая полностью пренебрегать упругим модулем C_{14} , мы попытались решить уравнение (1) по теории возмущений, удерживая члены линейные и квадратичные по величине C_{14}^2 . Эта процедура оказалась хорошей только для третьей волны благодаря большому различию по величине между C_{14} и C_{11} , C_{33} . Для второй и особенно для первой волны теория возмущений представляет собой разложение по параметру $C_{14}^2/C_{44}(C_{66} - C_{44})$, который вообще не мал, и теория возмущений оказывается неприменимой. Заметим, что упругие модули C_{14} и C_{44} одного порядка величины. Мы развили модифицированную теорию возмущений, где использовалась малость обоих этих модулей по сравнению со всеми остальными, тогда как соотношение между ними считалось произвольным. В этой модели выражения частот первой и второй волн следующие:

$$\omega_{1q}^2 = \frac{1}{\rho} \left[C_{44} q^2 - \frac{2C_{14} q_x q_z (q_x^2 - 3q_y^2) ((C_{11} C_{33})^{1/2} q_1^2 - C_{33} q_z^2)}{q_1^2 (C_{11} q_1^2 + C_{33} q_z^2)} \right], \quad (4a)$$

$$\omega_{2q}^2 = \frac{1}{\rho} \left[C_{66} q_1^2 + C_{44} q_2^2 - \frac{2C_{14} q_x q_z (q_x^2 - 3q_y^2)}{q_1^2} \right]. \quad (4b)$$

Поскольку линейная поправка к частотам при усреднении обращается в нуль, учитывались квадратичные поправки по C_{14} , C_{44} , которые содержат малый параметр $C_{14}^2/C_{44}C_{66}$. Таким образом, мы определили анизотропные поправки к скоростям упругих волн, использованные далее.

В настоящей статье мы покажем, что данные по анизотропии упругости для кристаллов этой симметрии позволяют вычислить такие термодинамические характеристики фононной системы, как теплоемкость и анизотропную скорость второго звука, а также определить анизотропию кинетических коэффициентов. Мы сопоставим эти вычисления с экспериментальными значениями указанных величин в висмуте.

2. Фононная теплоемкость C_Φ определяется как

$$C_\Phi = \sum_i \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \hbar \omega_{iq} \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial T}, \quad (5)$$

где T — температура, $N_0(\omega_{iq}) = [\exp(\hbar \omega_{iq}/kT) - 1]^{-1}$ — планковская функция распределения. Используя выражения для частот в модели поперечно-изотропной упругой среды (4), легко получить

$$C_\Phi = \frac{2\pi^2}{15} \frac{k^4 T^3}{\hbar^3} \sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-1/2}. \quad (6)$$

Видно, что эта формула довольно чувствительна к малым значениям скоростей, так как скорости упругих волн стоят в знаменателе. Подстановка численных значений дает величину $C_{\Phi} = 456T^3$ эрг/К. Экспериментальные значения фоновой теплоемкости висмута при низких температурах в единицах эрг/К равны: $(550 \pm 19)T^3$ [4], $525 T^3$ [5], $(528 \pm 12)T^3$ [6] и достаточно хорошо согласуются со значением теплоемкости в дебаевской модели [7].

$$C_{\Phi} = \frac{12\pi^4}{5} kn_0 (T/\theta)^3 \quad (7)$$

с температурой Дебая висмута $\theta = 120$ К. Здесь $n_0 = 2.82 \cdot 10^{22}$ см⁻³ — число атомов Вi в 1 см³, а дебаевская теплоемкость равна $C_{\Phi} = 527 T^3$ эрг/К и превышает вычисленную выше величину на 14%. Чтобы понять, с каким приближением связано это расхождение, была определена теплоемкость в модели гексагонального кристалла, т. е. при определении частот упругих волн из уравнения $\Delta_0 = 0$ мы использовали равенство (2). После этого теплоемкость определялась численным интегрированием выражения (4) с указанными значениями упругих констант для висмута. Это дало величину $C_{\Phi} = 472 T^3$ эрг/К и сократило расхождение на 3%. Таким образом, основная причина расхождения не в приближении поперечно-изотропной упругости среды, а в пренебрежении ромбоэдрической симметрией, т. е. модулем C_{14} и связанным с ним изменением скорости упругих волн. Теперь определим теплоемкость, используя выражения для частот, даваемых модифицированной теорией возмущений (формула (4) плюс квадратичные поправки). Такое трудоемкое вычисление с указанными упругими модулями висмута дает увеличение коэффициента в выражении для теплоемкости на 10% величины и сокращает расхождение теоретических и экспериментальных данных.

3. Важной термодинамической характеристикой фононной системы является тензор массовой плотности P_{Is} , связывающий средний импульс и среднюю дрейфовую скорость фононной системы [8]:

$$P_{Is} = \sum_i \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} hq_i q_s \left[-\frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial \omega_{iq}} \right]. \quad (8)$$

P_{Is} — является тензором второго ранга, а для кристаллов тетрагональной, ромбоэдрической и гексагональной систем тензоры второго ранга имеют две независимые компоненты: P_{zz} и $P_{xx} = P_{yy}$. Скорость второго звука v_2 выражается через P_{Is} [8]:

$$v_2^2 = \frac{TC_{\Phi}}{9} \left(\frac{\cos^2 \varphi}{P_{zz}} + \frac{\sin^2 \varphi}{P_{xx}} \right), \quad (9)$$

где φ — угол между осью z и направлением распространения волны второго звука. Вычисляя P_{Is} в модели поперечно-изотропной упругой среды, мы, согласно (3), (8), (9), получим выражение

$$v_2^2 = \frac{1}{3} \sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-1/2} \left[\frac{\cos^2 \varphi}{\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-3/2}} + \frac{\sin^2 \varphi}{\sum_i (a_i)^{-2} (b_i)^{-1/2}} \right]. \quad (10)$$

Видно, что эта формула, подобно (6), чувствительна к малым значениям скоростей упругих волн.

Подставляя в (10) значения упругих модулей, получаем для скорости второго звука вдоль оси z значение $v_2 = 6.9 \cdot 10^4$ см/с, а поперек оси z — $8.2 \cdot 10^4$ см/с. Для висмута измерения были сделаны Нараянамурти и Динесом [9], получившими вдоль оси z значение $7.8 \cdot 10^4$ см/с, а поперек — значение порядка $9 \cdot 10^4$ см/с. Расхождение вычисленных по теории и экспериментальных значений

составляет около 12%. Попытка улучшить это соотношение, как это было сделано для теплоемкости, благодаря изменению малых скоростей упругих волн при учете поправок пропорциональных модулю C_{14} оказалась безуспешной. Рассчитанное с помощью модифицированной теории возмущений изменение вклада первой волны в тензор P_{1s} оказалось равным 46%, т. е. модифицированная теория возмущений для расчета тензора P_{1s} оказалась неприменимой. Причину можно рассмотреть в формуле (10): в тензоре P_{1s} знаменатель содержит высшие степени малых скоростей упругих волн, что требует довольно точного расчета значений этих скоростей. Отметим, что модель поперечно-изотропной упругой среды, игнорирующая это обстоятельство, дает даже для этой величины неплохое согласие теории и эксперимента.

4.1. Коэффициент теплопроводности является тензором второго порядка и в кристаллах тетрагональной, ромбоэдрической и гексагональной систем имеет две независимые компоненты κ_{zz} и $\kappa_{xx} = \kappa_{yy}$. Фононы участвуют как в процессах нормального рассеяния, при которых сохраняются общая энергия и импульс фононной системы, так и в резистивных процессах, при которых происходит потеря энергии и импульса. Начиная с некоторых температур частота нормальных процессов становится сравнимой с частотой резистивных процессов и в этих условиях теплопроводность определяется следующим образом [8]:

$$\kappa_{1s} = \sum_i \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} (v_i)_1 (v_i)_s \tau_{iq} \hbar \omega_{iq} \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial T}, \quad (11)$$

где $(v_i)_s = \partial \omega_{iq} / \partial q_s$ — компоненты вектора скорости фонона, а τ_{iq} — время релаксации фононов i -той ветви частот. Довольно часто высказывалось мнение, что анизотропия теплопроводности определяется в основном анизотропией фононных скоростей. Строгая формулировка этой мысли состоит в гипотезе, что $\tau_{iq} = \tau(\omega_{iq})$, где $\tau(\omega_{iq})$ — единая функция для любой ветви частот. Теперь мы используем модель поперечно-изотропной упругой среды с частотами (3) и упростим выражение (11):

$$\kappa_{xx} = \frac{2k^4 T^3}{3(2\pi)^2 \hbar^3} \int dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \tau \left(x \frac{kT}{\hbar} \right) \sum_i (b_i)^{-1/2}, \quad (12a)$$

$$\kappa_{zz} = \frac{2k^4 T^3}{3(2\pi)^2 \hbar^3} \int dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \tau \left(x \frac{kT}{\hbar} \right) \sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{1/2}. \quad (12b)$$

Согласно (12), анизотропия теплопроводности также зависит от малых значений фононных скоростей.

В «грязном» диэлектрике фононы преимущественно рассеиваются на примесях, но наряду с ними необходимо учитывать рассеяние фононов на фононах [10]. Полная частота рассеяния определяется суммой частот фонон-примесного и фонон-фононного рассеяния. Для нахождения теплопроводности используется та же формула (11), хотя выражения для полной частоты рассеяния в чистом и «грязном» диэлектриках различаются.

Для висмута в тех случаях, когда применима формула (11), мы получаем из (12) для коэффициента анизотропии $\eta = \kappa_{22} / \kappa_{33}$ значение 1.36. Довольно трудоемкий расчет, использующий определенные модифицированной теорией возмущений частоты упругих волн, дает для коэффициента анизотропии теплопроводности величину $\eta = 1.52$, которая согласуется с экспериментальными данными [11, 12] для чистого Bi при $T \Theta \approx 120$ К.

4.2. При низких температурах в чистом висмуте нормальные процессы рассеяния преобладают над резистивными. В этих условиях выражение для теплопроводности отличается от (11):

$$\kappa_{I_s} = \kappa_{I_s}^R + \kappa_{I_s}^N. \quad (13)$$

Основной член определяется резистивными столкновениями [8], к которым относятся процессы переброса или рассеяние фононов на примесях, относительная концентрация которых (C) считается малой ($C \ll 1$):

$$\begin{aligned} \kappa_{I_s}^R = & \frac{\hbar}{T} \sum_i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \omega_{iq} (v_i)_{I'} q_{I'} \left(- \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial \omega_{iq}} \right) (K^{-1})_{I's'} \times \\ & \times \sum_{I'} \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \omega_{I'q'} (v_{I'})_s q_{s'} \left(\frac{\partial N_0(\omega_{I'q'})}{\partial \omega_{I'q'}} \right), \end{aligned} \quad (14)$$

где $K_{I_s} = \sum_i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{q_I q_s}{\tau^R(\omega_{iq})} \left(- \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial \omega_{iq}} \right)$, $(K^{-1})_{I_s}$ — тензор, обратный тензору K_{I_s} , $\tau(\omega_q^R)$ — время релаксации резистивных процессов. Используя модель поперечно-изотропной среды (3), преобразуем (14):

$$\kappa_{zz}^R = \frac{4\pi^6}{675} \frac{k^4 T^3}{\hbar^3 \int_0^\infty dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \frac{1}{\tau^R(x \cdot kT/\hbar)}} \frac{[\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-1/2}]^2}{\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-3/2}}, \quad (15a)$$

$$\kappa_{xx}^R = \frac{4\pi^6}{675} \frac{k^4 T^3}{\hbar^3 \int_0^\infty dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \frac{1}{\tau^R(x \cdot kT/\hbar)}} \frac{[\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-1/2}]^2}{\sum_i (a_i)^{-2} (b_i)^{-1/2}}. \quad (15b)$$

Если основным резистивным процессом является рассеяние на примесях, то его зависимость от частоты хорошо известна: $1/\tau^R \sim \omega^4$, что позволяет взять интеграл, стоящий в знаменателе формулы (15). После этого формулы преобразуются следующим образом:

$$\kappa_{zz}^R = \frac{1}{720\pi^2} \frac{k^4 T^3}{\hbar^3} \tau^R(kT/\hbar) \frac{[\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-1/2}]^2}{\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-3/2}}, \quad (16a)$$

$$\kappa_{xx}^R = \frac{1}{720\pi^2} \frac{k^4 T^3}{\hbar^3} \tau^R(kT/\hbar) \frac{[\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-1/2}]^2}{\sum_i (a_i)^{-2} (b_i)^{-1/2}}. \quad (16b)$$

Так как численный коэффициент в (16) очень мал, может оказаться важным поправочное слагаемое κ^N , пропорциональное времени релаксации нормальным фонон-фононным столкновениям $\tau^N(\omega_{iq})$ [13]:

$$\kappa_{I_s}^N = \kappa_{I_s}^{N1} + \kappa_{I_s}^{N2} + \kappa_{I_s}^{N3}, \quad (17)$$

$$\kappa_{is}^{N1} = \sum_i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} (v_i)_l (v_i)_s \omega_{iq} \tau^N(\omega_{iq}) \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial T}, \quad (17a)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{is}^{N2} = & -\sum_i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_{iq}}{T} (v_i)_l q_l \frac{\tau^N(\omega_{iq})}{\tau^R(\omega_{iq})} \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial \omega_{iq}} (K^{-1})_{l's'} \times \\ & \times \sum_{i'} \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \omega_{i'q'} q_{s'} (v_{i'})_s \frac{\partial N_0(\omega_{i'q'})}{\partial \omega_{i'q'}} - \sum_i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \omega_{iq} (v_i)_l q_l \times \\ & \times \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial \omega_{iq}} (K^{-1})_{l's'} \sum_{i'} \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_{i'q'}}{T} q_{s'} (v_{i'})_s \frac{\tau^N(\omega_{i'q'})}{\tau^R(\omega_{i'q'})} \frac{\partial N_0(\omega_{i'q'})}{\partial \omega_{i'q'}}, \\ \kappa_{is}^{N3} = & \sum_i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_{iq}}{T} (v_i)_l q_l \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial \omega_{iq}}, \end{aligned} \quad (176)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{i'} \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \omega_{i'q'} q_{s'} (v_{i'})_s \frac{\partial N_0(\omega_{i'q'})}{\partial \omega_{i'q'}} (K^{-1})_{l'l'} (K^{-1})_{s's'} \times \\ & \times \sum_{i''} \int \frac{d^3 q''}{(2\pi)^3} q_{i''} q_{s''} \frac{\tau^N(\omega_{i''q''})}{(\tau^R(\omega_{i''q''}))^2} \left(-\frac{\partial N_0(\omega_{i''q''})}{\partial T} \right). \end{aligned} \quad (17b)$$

Слагаемые κ^N имеют одинаковый порядок величины по параметру τ^N / τ^R , но в книге [13] было приведено только первое слагаемое. В модели поперечно-изотропной упругой среды мы упростим эти формулы. При этом для κ^{N1} получается формула (12), где стоит время релаксации нормальных процессов. Для остальных слагаемых — выражение, аналогичное формуле (15):

$$\kappa_{zz}^{N2} + \kappa_{zz}^{N3} = \zeta(T) \frac{[\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-1/2}]^2}{\sum_i (a_i)^{-1} (b_i)^{-3/2}}, \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} \zeta(T) = & \frac{k^4 T^3}{\hbar^3} \frac{2\pi^2}{45} \left\{ -\frac{\int_0^\infty dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \frac{\tau^N(xkT/\hbar)}{\tau^R(xkT/\hbar)}}{\int_0^\infty dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \frac{1}{\tau^R(xkT/\hbar)}} + \right. \\ & \left. + \frac{2\pi^4}{15} \frac{\int_0^\infty dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \frac{\tau^N(xkT/\hbar)}{(\tau^R(xkT/\hbar))^2}}{\left[\int_0^\infty dx \frac{x^4}{4 \operatorname{sh}^2(x/2)} \frac{1}{\tau^R(xkT/\hbar)} \right]^2} \right\}. \end{aligned}$$

В слагаемые κ^R и $\kappa^{N2} + \kappa^{N3}$ входят одинаковые отношения скоростей, определяющие анизотропию теплопроводности, а в слагаемом κ^{N1} стоит другая функция скоростей. В упрощенном анализе будем считать, что и в слагаемом κ^{N1} такие же коэффициенты, которые входят в формулы (18) и (15). Определяемый этими формулами коэффициент анизотропии теплопроводности равен $\eta \approx 1.25$. Согласно экспериментальным данным [11], в чистом Вi анизотропии теплопроводности $\eta \approx 1.7$ в температурной области $T \approx 3.5 \text{ K} < T < 10 \text{ K}$.

4.3. При очень низких температурах теплопроводность определяется только рассеянием фононов на границах — казимировский режим теплопроводности. Приведем расчет этого случая для длинного цилиндра, диаметр которого d много меньше длины свободного пробега фонона. Задавая диффузионный закон рассеяния фонона на границе, найдем функцию распределения фононов пропорциональную градиенту температуры:

$$n_{iq} = -v_{iz'} \frac{dT}{dz'} \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial T} \left[\frac{\left(d^2/4 - (x'v_{iy'} / v_{i\perp} - y'v_{ix'} / v_{i\perp}^2) \right)^{1/2}}{v_{i\perp}} + \frac{(x'v_{ix'} + y'v_{iy'})}{v_{i\perp}} \right]. \quad (19)$$

Ось z' направлена вдоль градиента температуры, а оси x' и y' перпендикулярны к ней. Если градиент температуры направлен вдоль оси симметрии третьего порядка, штрихованная система координат совпадает с нештрихованной кристаллической; если же градиент перпендикулярен этой оси симметрии, ось z' совпадает с осью x , а ось x' — с осью z . Вычисляя средний поток энергии и усредняя его по сечению образца, мы вычислим эффективную теплопроводность в казимировском режиме κ^C . Это выражение не содержит времен релаксации, т. е. является как бы термодинамическим:

$$\kappa_{zz}^C = \frac{2\pi^2}{45} \frac{k^4 T^3}{h^3} d \Sigma_i (a_i)^{-3/2} (b_i)^{1/2}, \quad (20a)$$

$$\kappa_{xx}^C = \frac{2\pi^2}{45} \frac{k^4 T^3}{h^3} d \Sigma_i (a_i)^{-1/2} (b_i)^{-1/2} \frac{2}{\pi} K((a_i - b_i)/a_i)^{1/2}, \quad (20b)$$

где K — полный эллиптический интервал первого рода. При наших значениях констант можно разложить функцию K в ряд $\frac{2}{\pi} K(t) = 1 + t^2/4$, после чего получается следующее значение коэффициента анизотропии $\eta^C = 1.22$. Анизотропия теплопроводности по экспериментальным данным [11] для чистого Bi в области граничного рассеяния фононов составляет $\eta^C \approx 1.7$ в температурном интервале $2 < T < T_M = 3.5$ К. В работе [14] измерения теплопроводности выполнялось в температурном интервале $1.3 < T < 2$ К и анизотропия теплопроводности составляет $\eta^C \approx 1.6$ при $T = 2$ К, а с понижением температуры анизотропия растет и составляет $\eta^C \approx 1.9$ при $T = 1.3$ К. Это обусловлено тем, что на эксперименте наблюдаются различные температурные зависимости для компонент теплопроводности в области размерного эффекта $\kappa_{22} \sim T^3$, а κ_{33} имеет более крутую зависимость, чем T^3 .

4.4. В модели поперечно-изотропной среды для «грязного» диэлектрика можно вычислить теплопроводность в районе температурного максимума, когда основным процессом рассеяния являются рассеяние фононов на примесях и на границах. При диффузном законе отражения фононов от границы функция распределения фононов равна

$$n_{iq} = -v_{iz'} \frac{dT}{dz'} \frac{\partial N_0(\omega_{iq})}{\partial T} \tau_n(\omega_{iq}) \times \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{(x'v_{ix'} + y'v_{iy'}) + (d^2/4 - (x'v_{iy'} - y'v_{ix'})/v_{i\perp}^2)^{1/2}}{v_{i\perp} \tau_n(\omega_{iq})} \right] \right\}. \quad (21)$$

Здесь τ_n — время релаксации, обусловленное релеевским рассеянием фононов на примесях. Функция распределения (19) получается из (21) предельным переходом $\tau_n \rightarrow \infty$. Вычисление среднего потока энергии через круговое сечение цилиндра в модели поперечно-изотропной среды дает

$$\kappa_{zz} = \frac{k^4 T^3}{h^3} d^{1/4} \tau_n^{3/4} (xkT/h) \frac{256}{297} \frac{\Gamma^2(5/8) \Gamma^2(7/8)}{\pi^3 \Gamma(1/4)} \times \\ \times \sum_i (a_i)^{-1/4} (b_i)^{-3/8} {}_2F_1\left(\frac{19}{8}, \frac{7}{8}, \frac{19}{8}, \frac{a_i - b_i}{b_i}\right), \quad (22)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция, а ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, z)$ — гипергеометрическая функция. При наших значениях a_i и b_i ее можно аппроксимировать отношением b_i/a_i . Выражение для поперечной теплопроводности является довольно сложным:

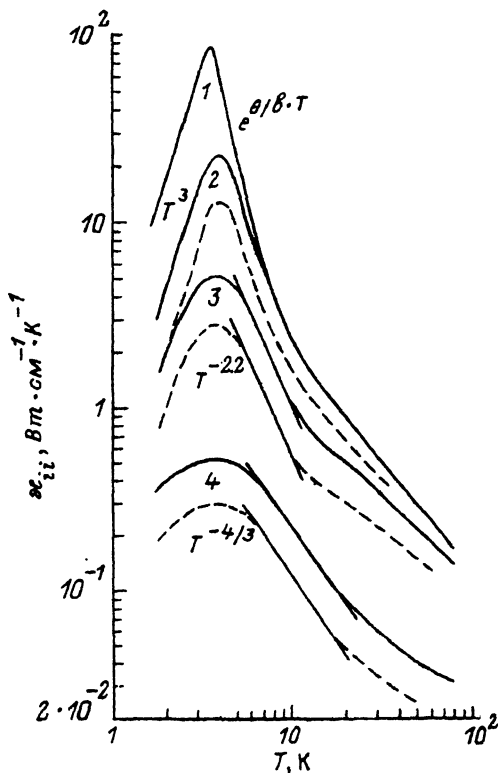
$$\kappa_{xx} = \frac{k^4 T^3}{h^3} d^{1/4} \tau_n^{3/4} (xkT/h) \frac{64}{9\pi^{3/2}} \frac{(2)^{1/2} \sin(\pi/8) \Gamma(5/8) \Gamma(7/8)}{\Gamma(1/4)} \times \\ \times \sum_i (b_i)^{-1/2} \int_0^1 \int_0^1 dx dt \frac{(1-x^2)(1-t^2)^{1/2}}{[b_i x^2 + a_i t^2 (1-x^2)]^{1/8}}. \quad (23)$$

Первая ветвь фононов, для которой $a_3 = b_3$, дает в κ_{xx} и κ_{zz} одинаковый вклад. Оказывается, однако, что интеграл в (22) раскладывается в хорошо сходящийся ряд, и это выражение упрощается:

$$\kappa_{xx} = \frac{k^4 T^3}{h^3} d^{1/4} \tau_n^{3/4} (xkT/h) \frac{256}{297\pi^3} \times \\ \times \frac{\Gamma^2(5/8) \Gamma^2(7/8)}{\Gamma(1/4)} \times \\ \times \sum_i (a_i)^{-1/8} (b_i)^{-1/2}. \quad (24)$$

Для коэффициента анизотропии теплопроводности получается значение $\eta = 1.36$.

Случай «грязного» диэлектрика реализуется при измерении теплопроводности на сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ с концентрацией сурьмы $0.8 < x \leq 0.15$ [10]. Исследование фононной теплопроводности проводилось нами на сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ в температурной области $1.8 \leq T < 100$ К. Для измерения исполь-



Температурная зависимость фононной теплопроводности сплавов $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, измеренной на монокристаллических образцах.

1 — данные работы [14] для совершенного кристалла Bi с поперечными размерами 8.8-8.9 мм², 2 — данные работы [14] для Bi с диаметром ~2.6 мм, 3 — $\text{Bi}_{0.999}\text{Sb}_{0.001}$, 4 — $\text{Bi}_{0.865}\text{Sb}_{0.135}$. Сплошные кривые соответствуют $\kappa_{22}(\text{VTC}_1)$, пунктирные — $\kappa_{33}(\text{VTC}_3)$.

зовались монокристаллические образцы в виде прямоугольного параллелепипеда с размерами, близкими к $4 \times 4 \times 40$ мм³, двух типов. Для одних наибольший размер параллелепипеда совпадал с направлением биссекторной оси C_1 , а для других — с направлением тригональной оси C_3 . Поток тепла совпадал с одним из этих направлений и градиент температуры был параллелен осям C_1 или C_3 ($C_1 \parallel \nabla T$ или $C_3 \parallel \nabla T$). При температурах выше 20 К выделение фононной составляющей теплопроводности κ_{22} и κ_{33} из полной осуществлялось путем подавления электронной доли сильным магнитным полем. Характерные температурные зависимости для висмута и сплавов Bi—Sb представлены на рисунке. Анизотропия теплопроводности равна $\kappa_{22} / \kappa_{33} \approx 1.7$ в сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ в исследованном температурном интервале.

Таким образом, используя данные ультразвуковых измерений упругих модулей, мы теоретически вычислили термодинамические величины — теплоемкость и скорость второго звука. Использование простой модели поперечно-изотропной упругой среды приводит к неплохому совпадению теоретических и экспериментальных значений, тогда как уточнение теории, связанное с учетом всех упругих модулей, позволяет сделать это соотношение довольно точным. При рассмотрении кинетических величин коэффициент анизотропии теплопроводности оказался довольно чувствительным к малым значениям скорости фононов, поэтому в простой модели его величина была несколько заниженной по сравнению с экспериментальными данными теплопроводности. Но и для него учет ромбоэдрической симметрии позволяет улучшить это соотношение. Мы думаем, что рассмотрение фононных свойств анизотропной среды и полученные выше формулы позволят улучшить обработку экспериментальных данных как для висмута, так и для других кристаллов.

Список литературы

- [1] Eckstein Y., Lawson A. W., Reneker D. H. // J. Appl. Phys. 1960. V. 31. N 9. P. 1534—1538.
- [2] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1987.
- [3] Коренблит И. Я. // ФТП. 1968. Т. 2. В. 10. С. 1425—1435.
- [4] Калинин И. Н., Стрелков П. Г. // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. В. 3. С. 617—621.
- [5] Phillips N. E. // Phys. Rev. 1960. V. 118. N 3. P. 644—647.
- [6] Collan H. K., Krusius M., Pickett G. R. // Phys. Rev. B. 1970. V. 1. N 7. P. 2888—2895.
- [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. I. М.: Наука, 1976.
- [8] Гуревич В. Л. Кинетика фононных систем. М.: Наука, 1980.
- [9] Narayanamurti V., Dynes R. C. // Phys. Rev. Lett. 1972. V. 28. N 22. P. 1461—1465.
- [10] Каган В. Д., Редько Н. А. // ЖЭТФ. 1991. Т. 100. С. 1205—1218.
- [11] Коренблит И. Я., Кузнецов М. Е., Муждаба В. М., Шалыт С. С. // ЖЭТФ. 1969. Т. 57 № 12. С. 1868—1876.
- [12] Gallo C. F., Chandrasekhar B. S., Sutter P. H. // J. Appl. Phys. 1963. V. 34. N 1. P. 144—156.
- [13] Оскотский В. С., Смирнов И. А. Дефекты в кристаллах и теплопроводность. Л.: Наука, 1972.
- [14] Bhagat S. M., Manchon D. D. // Phys. Rev. 1967. V. 164. N 3. P. 966—970.
- [15] Issi J.-P., Hermans J. // Proc. 15th Int. Conf. Thermal Conductivity. Ottawa, 1977. P. 63—67.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
23 июня 1992 г.