

03
**Времена релаксации и длины свободного пробега фононов
в режиме граничного рассеяния для монокристаллов кремния**

© И.И. Кулеев¹, И.Г. Кулеев¹, С.М. Бахарев¹, А.В. Инюшкин²

¹ Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

² НИЦ „Курчатовский институт“,
Москва, Россия

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 29 февраля 2012 г.
В окончательной редакции 15 июня 2012 г.)

Исследована фокусировка фононов в кубических диэлектрических кристаллах, а также ее влияние на теплоперенос в режиме граничного рассеяния фононов при низких температурах. В модели анизотропного континуума рассчитаны длины пробега фононов различных поляризаций в образцах бесконечной и конечной длины с круглым и квадратным сечениями. Для образцов бесконечной длины с круглым и квадратным сечениями в случае равенства площадей поперечных сечений угловые зависимости длин свободного пробега, нормированных на длину Казимира, почти совпадают. Показано, что анизотропия длин пробега заметно уменьшается при переходе от бесконечных образцов к образцам конечной длины. Для кристаллов кремния проанализирована анизотропия средних длин свободного пробега фононов для каждой из ветвей фононного спектра. Установлено, что длины свободного пробега для фононов каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега для фононов остальных колебательных мод.

Работа выполнена по плану РАН в рамках темы № 01. 2. 006. 13395 при поддержке программы ОФН РАН (грант № 12-Т-2-1018), гранта „Династия“, а также гранта ведущей научной школы НШ-6172.2012.2.

1. Введение

В связи с развитием технологии наноструктурированных материалов в последние годы значительный интерес представляют исследования их теплопроводящих свойств [1,2]. Особенности фононного теплопереноса в таких материалах обусловлены тем, что (по крайней мере, в одном направлении) длина свободного пробега тепловых фононов или их длина волны сравнимы с соответствующим пространственным размером. В том случае, когда длина свободного пробега фононов оказывается порядка наименьшего размера структуры, ее величина определяется характером взаимодействия фононов с поверхностью; такую ситуацию принято называть режимом граничного рассеяния фононов. Впервые задачу о теплопроводности тонкого диэлектрического стержня бесконечной длины рассмотрел Казимир [3]. Он проанализировал случай изотропного континуума, когда рассеяние фононов на границах образца носит чисто диффузный характер, т.е. все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца с интенсивностью, которая зависит от температуры поверхности в соответствии с теорией излучения абсолютно черного тела. Представляя теплопроводность в стандартной форме газокINETической теории теплопроводности: $\kappa = 1/3 C_V \bar{v} \Lambda$, где C_V — теплоемкость единицы объема, \bar{v} — средняя скорость частиц, Λ — средняя длина их свободного пробега, Казимир нашел,

что длина пробега в цилиндрическом стержне равна его диаметру D . Позже Берман с коллегами [4,5] рассмотрели влияние частичного зеркального отражения фононов от поверхности образца и его конечной длины L на теплопроводность в режиме граничного рассеяния. В частности, было показано, что учет конечной длины приводит к уменьшению теплопроводности по сравнению с бесконечным образцом на относительную величину порядка D/L . Однако аналитических выражений для поправок к теплопроводности из-за конечной длины образца приведено не было. Отметим также, что для бесконечно длинных стержней с прямоугольным сечением $D_1 \times D_2$, где D_1 и D_2 — размеры сторон прямоугольника, были получены формулы для средней длины свободного пробега фононов в случаях чисто диффузного [6,7] и частично зеркального [8] рассеяния от поверхности стержня. Совсем недавно были теоретически рассмотрены случаи стержней с треугольным, гексагональным и другими сечениями [9], поскольку некоторые нанопровода имеют такие профили.

Теплопроводность стержня конечных размеров в режиме граничного рассеяния зависит не только от его размеров; она может зависеть и от ориентации стержня относительно кристаллографических осей. Ориентационная зависимость теплопроводности возникает благодаря эффекту фононной фокусировки в упруго-анизотропном кристалле [6,10]: из-за неколлинеарности фазовой S и групповой V_g скоростей фононный поток, излучаемый точечным источником тепла, фокусируется

вдоль определенных (симметричных) направлений в кристаллической решетке. Экспериментальные исследования теплопроводности кристаллов Si и CaF₂ в форме стержней с квадратным сечением, выполненные МакКарди, Марисом и Элбаумом [6], подтвердили влияние фононной фокусировки на теплопроводность при температурах ниже максимума теплопроводности, причем для Si эффект составил около 50% (40% для CaF₂) в режиме граничного рассеяния. Для кремния величина теплопроводности была наивысшей у образцов с ориентацией вдоль оси [100] и низшей для стержней с длинной осью вдоль [111]. При температурах выше максимума, когда длина свободного пробега фононов становится меньше поперечных размеров образца, теплопроводность кубических кристаллов становится изотропной: она не зависит от направления в кристалле.

В работе [6] теория Казимира [3] была обобщена на случай упругоанизотропных кристаллов. Предполагалось, что поток тепла и распределение температур однородны по длине образца; также предполагалось наличие плоскости зеркальной симметрии, перпендикулярной оси образца. В этих предположениях были рассчитаны величины теплопроводности кристаллов Si и CaF₂ и длины свободного пробега фононов для симметричных направлений без использования подгоночных параметров. Рассмотрены случаи образцов круглого и прямоугольного сечения бесконечной и конечной длины. Рассчитанные значения средних длин свободного пробега фононов согласуются с экспериментальными данными с погрешностью, не превышающей 8%. Для образцов бесконечной длины с круглым и прямоугольным сечениями получены аналитические выражения для величин, определяющих влияние фокусировки фононов на теплопроводность. Однако при расчете теплопроводности для образцов конечной длины в работе [6] возникает ряд ограничений на область интегрирования по волновым векторам фононов. Получить аналитические выражения для величин, определяющих релаксацию фононов в этом случае, авторам [6] не удалось. Расчет теплопроводности и длин свободного пробега фононов для симметричных направлений был выполнен численным методом.

С другой стороны, для расчета температурных зависимостей теплопроводности в рамках релаксационного метода для каждого из процессов рассеяния фононов необходимо определить соответствующую скорость релаксации. Эта проблема является актуальной для упругоанизотропных кристаллов, поскольку при температурах ниже максимума теплопроводности доминирует граничное рассеяние фононов, и эффект фокусировки фононов приводит к анизотропии теплопроводности. В настоящей работе в отличие от [6] нам удалось получить аналитические выражения для величин, определяющих влияние фокусировки фононов на теплопроводность кубических кристаллов конечной длины. Это позволило определить времена релаксации фононов различных поляризацій за счет рассеяния на границах для образцов конечной длины с круглым и квадратным сечениями в виде

кусочно-непрерывных функций. Отметим, что проблема фокусировки фононов не ограничивается расчетом теплопроводности диэлектрических кристаллов. Она может оказаться актуальной при исследовании кинетических явлений в металлах и полупроводниках, обусловленных взаимным увлечением электронов и фононов. В этом случае такие кинетические коэффициенты, как электропроводность и термоэдс электрон-фононного увлечения, становятся зависящими от механизма релаксации импульса фононов [11].

2. Групповая скорость и фокусировка фононов в кристаллах кремния

Спектр фононов с поляризацией λ и волновым вектором, гораздо меньшим дебаевского волнового вектора q_D , в модели анизотропного континуума имеет вид

$$\omega_q^\lambda = S^\lambda(\theta, \varphi)q. \quad (1)$$

Фазовая скорость $S^\lambda(\theta, \varphi)$ определяет анизотропию спектра. Она зависит от угловых переменных θ и φ вектора \mathbf{q} . В системе координат по ребрам куба имеем [12]

$$S^\lambda(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho} \left(1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \left(\frac{1}{3} + Z_\lambda \right) \right)^{1/2}},$$

$$Z_{t_1, t_2} = \frac{2}{3} r \cos \left(\frac{Q}{3} \mp \frac{2\pi}{3} \right), \quad Z_L = \frac{2}{3} r \cos \left(\frac{Q}{3} \right),$$

$$Q = \arccos p,$$

$$p = \frac{1 + 4.5(k^2 - 1)\xi + 13.5\eta(k - 1)^2(2k + 1)}{r^3},$$

$$r = \sqrt{1 + 3(k^2 - 1)\xi}, \quad k = \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{11} - c_{44}}, \quad (2)$$

где c_{ij} — упругие модули второго порядка, ρ — плотность кристалла, $\xi = n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2$ и $\eta = n_1^2 n_2^2 n_3^2$ — кубические гармоники, а $\mathbf{n} = \mathbf{q}/q = \{\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta\}$ — единичный волновой вектор фонона. Индекс L соответствует продольным фононам, а t_1 и t_2 отвечают „быстрой“ (верхней) и „медленной“ (нижней) поперечным колебательным модам.

Важной характеристикой, определяющей фононный транспорт и фокусировку фононов, является групповая скорость

$$\mathbf{V}_g^\lambda(\mathbf{q}) = d\omega^\lambda(\mathbf{q})/d\mathbf{q}. \quad (3)$$

В системе координат по ребрам куба для произвольного направления волнового вектора фонона она может быть представлена в виде [13]

$$\mathbf{V}_g^\lambda(\theta, \varphi) = S^\lambda(\theta, \varphi) \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi),$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi) = \{\mathbf{n} + S_\theta^\lambda \mathbf{e}_\theta + S_\varphi^\lambda \mathbf{e}_\varphi\}. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{e}_\theta = \{\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta\}$, $\mathbf{e}_\varphi = \{-\sin \varphi, \cos \varphi, 0\}$, а вектор \mathbf{n} определен выше.

Нетрудно убедиться, что \mathbf{n} , \mathbf{e}_θ и \mathbf{e}_φ образуют тройку взаимно ортогональных единичных векторов. Величины $S_\theta^\lambda(\theta, \varphi)$ и $S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi)$ определяются выражениями

$$S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{S^\lambda} \frac{\partial S^\lambda}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial \theta} + \left(\frac{1}{S^\lambda} \frac{\partial S^\lambda}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial \theta},$$

$$S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \left\{ \left(\frac{1}{S^\lambda} \frac{\partial S^\lambda}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial \varphi} + \left(\frac{1}{S^\lambda} \frac{\partial S^\lambda}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} \right\}, \quad (5)$$

$$\frac{1}{S^\lambda} \frac{\partial S^\lambda}{\partial \xi} = \left[\left(\frac{S'_{100}}{S^\lambda} \right)^2 \frac{c_{11} - c_{44}}{2c_{44}} Z_\lambda \right] \frac{1.5(k^2 - 1)}{r^2}$$

$$\times \left\{ 1 - \frac{1.5(k^2 - 1)\xi + 13.5\eta(k - 1)^2(1 + 2k)}{(1 - p^2)^{1/2}r^3} \operatorname{tg} Q_\lambda \right\},$$

$$\frac{1}{S^\lambda} \frac{\partial S^\lambda}{\partial \eta} = \left[\left(\frac{S'_{100}}{S^\lambda} \right)^2 \frac{c_{11} - c_{44}}{2c_{44}} Z_\lambda \right]$$

$$\times \frac{4.5(k - 1)^2(1 + 2k)}{(1 - p^2)^{1/2}r^3} \operatorname{tg} Q_\lambda,$$

$$Q_L = \frac{Q}{3}, \quad Q_{l_{11}} = \frac{Q}{3} \mp \frac{2\pi}{3}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial \theta} = \sin 2\theta [\cos 2\theta + 0.5 \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi],$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial \varphi} = 0.5 \sin^4 \theta \sin 4\varphi,$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta} = \frac{1}{4} \sin 2\theta \sin^2 \theta [3 \cos^2 \theta - 1] \sin^2 2\varphi,$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \varphi} = \frac{1}{2} \sin^4 \theta \cos^2 \theta \sin 4\varphi. \quad (7)$$

Параметры Z_λ , p и r определены формулами (2). Компоненты групповой скорости фононов в декартовой системе координат имеют вид

$$V_{gX}^\lambda(\theta, \varphi) = S^\lambda(\theta, \varphi)$$

$$\times \{ \sin \theta \cos \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \cos \varphi - S_\varphi^\lambda \sin \varphi \},$$

$$V_{gY}^\lambda(\theta, \varphi) = S^\lambda(\theta, \varphi)$$

$$\times \{ \sin \theta \sin \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \sin \varphi + S_\varphi^\lambda \cos \varphi \},$$

$$V_{gZ}^\lambda(\theta, \varphi) = S^\lambda(\theta, \varphi) \{ \cos \theta - S_\theta^\lambda \sin \theta \}. \quad (8)$$

Для симметричных направлений [001], [101] и [111] имеем соответственно $\theta = 0$, $\varphi = 0$; $\theta = \pi/4$, $\varphi = 0$ и $\theta = 0.955$, $\varphi = \pi/4$.

В изотропной среде компоненты групповой скорости фононов S_θ^λ и S_φ^λ равны нулю, и направление групповой скорости совпадает с направлением волнового вектора. Эффект фокусировки отсутствует: плотность состояний изотропна (она постоянна для всех направлений). В кубических кристаллах анизотропия упругих свойств приводит к эффекту фокусировки фононов, т.е. возникно-

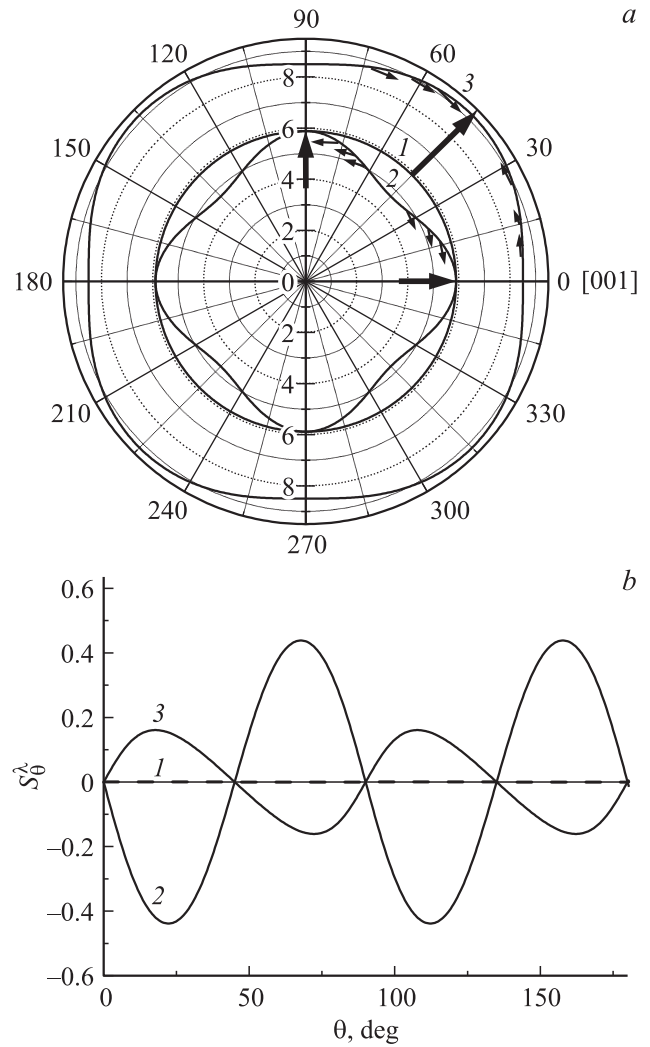


Рис. 1. Угловые зависимости фазовых скоростей $S^\lambda(\theta, \varphi)$ (10^5 cm/s) (a) и компонент групповой скорости фононов $S_\theta^\lambda(\theta, \varphi)$ (b) для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба. 1 — для быстрых поперечных, 2 — для медленных поперечных, 3 — для продольных фононов.

ванию направлений, в которых будут преимущественно распространяться фононы данной колебательной моды. Для иллюстрации эффекта фокусировки рассмотрим кристаллы кремния при низких температурах. Значения модулей упругости второго порядка c_{ij} при $T = 4.2$ К возьмем из работы [14]: $c_{11} = 1.6754 \cdot 10^{12}$ dyn/cm², $c_{12} = 0.6492 \cdot 10^{12}$ dyn/cm², $c_{44} = 0.8024 \cdot 10^{12}$ dyn/cm², а плотность $\rho = 2.33$ g/cm³. Для того чтобы проиллюстрировать эффект фокусировки фононов в кремнии, построим угловые зависимости S_θ^λ для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (рис. 1). Стрелками отмечены направления вектора S_θ^λ . Заметим, что в кубических кристаллах равенство $S_\theta^\lambda = 0$ выполняется для быстрой поперечной моды для волновых векторов в плоскости грани куба, а также для остальных мод в симметричных направлениях [001],

[101] и [111]. Если в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_\theta^\lambda < 0$, как это имеет место для медленной поперечной моды при $\varphi = 0$, то вектор групповой скорости будет отклоняться от направления волнового вектора \mathbf{n} к направлению [001]. В этом случае фононы моды t_2 фокусируются в направлениях типа [001]. Если в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_\theta^\lambda > 0$, как это имеет место для продольных фононов, то вектор групповой скорости будет отклоняться от направления волнового вектора \mathbf{n} к направлению [101]. В этом случае продольные фононы фокусируются в направлениях типа [101]. Эти направления на рис. 1 отмечены жирными радиальными стрелками. Таким образом, направления фокусировки фононов для различных мод в одном и том же кристалле различаются. Как видно из рис. 1, фокусировка фононов происходит в тех направлениях, в которых фазовая скорость фононов данной колебательной моды имеет максимальное значение. Так, например, для диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) фазовая скорость продольных фононов имеет максимальное значение в направлении [111], и фокусировка продольных фононов происходит именно в этом направлении.

3. Время релаксации и длины свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния для образцов бесконечной длины

Рассмотрим сначала диффузное рассеяние фононов на границах образца бесконечной длины в рамках обобщенной теории Казимира [6] и определим соответствующее время релаксации. 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. 5 из работы [6]). Рассмотрим элемент поверхности dS в окрестности точки с координатами (X_1, X_3) . Обозначим через $\mathbf{m}(X_1)$ единичный вектор, перпендикулярный поверхности образца и направленный внутрь его. Поток фононов с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ , покидающих этот элемент поверхности равен $(\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda)N_{q\lambda}^{(0)}(X_3, \mathbf{q})ds$, где $N_{q\lambda}^{(0)}(X_3, \mathbf{q})$ — функция распределения Планка, соответствующая температуре T рассматриваемого элемента. Предполагаем, что температура однородна по сечению образца, т.е. зависит только от координаты X_3 (что, вообще говоря, справедливо только для направлений в кристалле, имеющих плоскость зеркальной симметрии). Фононы, покидающие элемент поверхности dS , будут распространяться вдоль стержня, пока не столкнутся с поверхностью. Предполагая, что распределение температур и потока тепла однородно по образцу, авторы [6] подсчитали поток тепла, протекающий через плоскость $X_3 = 0$ слева направо и справа налево, и получили следующее выражение для

теплопроводности:

$$\kappa_\infty(T) = \frac{1}{2S_c} \sum_{\lambda, q} \hbar\omega_q^\lambda \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \times \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) (\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}))^2 = \sum_{\lambda, q} \hbar\omega_q^\lambda \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} I_\infty^\lambda, \quad (9)$$

где

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

S_c — площадь поперечного сечения образца, $\Lambda_3^\lambda(X_1, q)$ — проекция длины пробега фонона с импульсом \mathbf{q} и поляризацией λ на направление градиента температуры. Расчет величины I_∞^λ , проведенный в [6], для бесконечных образцов с круглым и квадратным сечениями дает соответственно

$$I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) = (8R/3\pi) [(V_{g3}^\lambda)^2 / V_{g\perp}^\lambda], \quad V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2} \quad (10)$$

и

$$I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{D}{6} \left(\frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g1}^\lambda} \right)^2 (3|V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|) \text{ при } |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|, \\ I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{D}{6} \left(\frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g2}^\lambda} \right)^2 (3|V_{g2}^\lambda| - |V_{g1}^\lambda|) \text{ при } |V_{g2}^\lambda| > |V_{g1}^\lambda|. \quad (11)$$

Здесь D — сторона квадрата, R — радиус цилиндра, V_g^λ — проекция групповой скорости на направление градиента температуры, а V_{g1}^λ и V_{g2}^λ — проекции групповой скорости на направления, перпендикулярные градиенту температуры и соответственно боковым граням образца. Компоненты групповой скорости фононов определены выражениями (3)–(8). Очевидно, что величина I_∞^λ является функцией углов (θ, φ) и будет иметь различный вид при изменении ориентации градиента температуры относительно осей кристалла. При сравнении формул (9)–(11) со стандартным выражением теплопроводности [15,16]

$$\kappa(T) = k_B \sum_{q, \lambda} \tau^\lambda(q) (V_{g3}^\lambda)^2 \left(\frac{\hbar\omega_q^\lambda}{k_B T} \right)^2 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \quad (12)$$

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

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) / (V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi))^2. \quad (13)$$

Из формул (10), (11) и (13) для бесконечных образцов с круглым и квадратным сечениями соответственно имеем

$$\tau_{B\infty}^\lambda(\theta, \varphi) = 8R / (3\pi V_{g\perp}^\lambda), \quad (14)$$

$$\begin{aligned}\tau_{B\infty}^{\lambda} &= \frac{D}{6} \frac{(3|V_{g1}^{\lambda}| - |V_{g2}^{\lambda}|)}{(V_{g1}^{\lambda})^2} \text{ при } |V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|, \\ \tau_{B\infty}^{\lambda} &= \frac{D}{6} \frac{(3|V_{g2}^{\lambda}| - |V_{g1}^{\lambda}|)}{(V_{g2}^{\lambda})^2} \text{ при } |V_{g2}^{\lambda}| > |V_{g1}^{\lambda}|.\end{aligned}\quad (15)$$

Выражение (14) для времени релаксации фононов на границах бесконечных образцов с круглым сечением совпадает с полученным ранее в работе [17]. Определим среднюю длину свободного пробега фононов $\Lambda_{B\infty}$ при рассеянии на границах в модели анизотропного континуума для образцов бесконечной длины при низких температурах ($T \ll T_D$), используя известное выражение кинетической теории газов для теплопроводности: $\kappa = \frac{1}{3} C_V \bar{S} \Lambda_{B\infty}$. Для этого в формуле (9) для теплопроводности выделим теплоемкость единицы объема

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

и среднюю скорость фононов

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

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 теплопроводности может быть представлено в виде

$$\begin{aligned}\kappa_{\infty}(T) &= \frac{1}{3} C_V \bar{S} \left[\frac{3}{4\pi} \right] \left[\sum_{\lambda 1} \langle (S^{\lambda 1})^{-2} \rangle \right]^{-1} \\ &\times \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 dx_{\theta} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3} = \frac{1}{3} C_V \bar{S} \Lambda_{B\infty},\end{aligned}\quad (16)$$

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

$$\Lambda_{B\infty} = \frac{3}{4\pi} \frac{1}{\sum_{\lambda 1} \langle (S^{\lambda 1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 dx_{\theta} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}.\quad (17)$$

Как видно из выражения (17), в дебаевском приближении теплопроводность пропорциональна теплоемкости и при низких температурах следует зависимости T^3 в соответствии с законом Дебая. Этот результат привлеч внимание исследователей к теории Казимира [5] (заметьте, что формула для теплопроводности в работе [5] содержит известную ошибку — лишний множитель $(\pi/2)$). Следует отметить, что для модели изотропной среды из выражения (17) следует результат Казимира: для цилиндрического стержня бесконечной длины $\Lambda_{B\infty} = 2R$.

Аналогичным образом можно определить средние длины свободного пробега фононов для каждой из ветвей фононного спектра. Для этого представим теплопроводность в виде аддитивной суммы от всех колебательных ветвей

$$\kappa_{\infty}(T) = \sum_{\lambda} \kappa_{\infty}^{\lambda}(T) = \sum_{\lambda} \frac{1}{3} C_V^{\lambda} \bar{S}^{\lambda} \Lambda_{B\infty}^{\lambda}.\quad (18)$$

Тогда длина пробега $\Lambda_{B\infty}^{\lambda}$ для фононов ветви λ может быть представлена в виде

$$\Lambda_{B\infty}^{\lambda} = \left[\frac{3}{4\pi} \right] \frac{1}{\langle (S^{\lambda})^{-2} \rangle} \int_{-1}^1 dx_{\theta} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}.\quad (19)$$

Для образцов с круглым сечением в качестве I_{∞}^{λ} нужно взять выражение (10), а для образцов с квадратным сечением — (11). Итак, длины свободного пробега фононов при низких температурах для граничного рассеяния в модели анизотропного континуума выражаются через двукратный угловой интеграл.

4. Время релаксации фононов на границах для образцов конечной длины

Рассмотрим рассеяние фононов на границах и определим время релаксации для образцов конечной длины. Согласно [6], теплопроводность для них должна быть уменьшена на величину $\Delta\kappa(T)$

$$\kappa(T) = \kappa_{\infty}(T) - \Delta\kappa(T),\quad (20)$$

причем поправка $\Delta\kappa(T)$ для образца длиной L имеет вид

$$\begin{aligned}\Delta\kappa(T) &= \sum_{\lambda, q} * \hbar\omega_q^{\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \left\{ \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^{\lambda}) \right. \\ &\times \left. \left\{ \left| \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2 \right\} = \sum_{\lambda, q} * \hbar\omega_q^{\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \Delta I^{\lambda},\end{aligned}\quad (21)$$

$$\Delta I^{\lambda}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^{\lambda}) \left\{ \left| \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2.\quad (22)$$

Звездочка у знака суммирования по волновым векторам в формуле (21) означает, что в $\Delta\kappa(T)$ вносят вклад только те фононы, для которых выполняется неравенство

$$\left| \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right| \geq L/2.\quad (23)$$

При вычислении интеграла по контуру X_1 мы также должны учитывать неравенство (23). Выражение (20)

для образцов конечной длины можно представить в виде

$$\kappa(T) = \sum_{\lambda, q} \hbar \omega_q^\lambda \frac{dN_q^{(0)}}{dT} I^\lambda(\theta, \varphi),$$

$$I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) - \Delta I^\lambda(\theta, \varphi). \quad (24)$$

Неравенство (23) накладывает ограничения на область интегрирования по волновым векторам в выражении для поправки к теплопроводности. Поэтому непосредственным образом ввести время релаксации фононов на границах образца в методе, предложенном в [6], не представляется возможным. К сожалению, авторам [6] не удалось получить аналитические выражения для величин $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$. Расчет теплопроводности для кубических кристаллов в режиме граничного рассеяния и соответственно параметров фокусировки в симметричных направлениях был выполнен численным методом.

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

Ввиду отсутствия аналитических расчетов времен релаксации за сорок лет со времени опубликования работы [6] не появилось ни одной публикации, в которой бы анализировались температурные зависимости теплопроводности диэлектрических кристаллов с учетом фокусировки фононов. В связи с этим в Приложениях А и В мы воспроизвели некоторые детали расчета релаксационных функций при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым и квадратным сечениями. В Приложениях показано, что при аналитическом расчете функций $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ и $I^\lambda(\theta, \varphi)$ для образцов конечной длины ограничения, накладываемые условием (23), в выражениях для теплопроводности (21) и (24) сводятся к системе неравенств между геометрическим параметром $k_0 = L/2D$ и отношениями компонент групповой скорости фононов. Поскольку эти неравенства могут быть включены в определение функций $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ и $I^\lambda(\theta, \varphi)$, мы получаем возможность определить времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образца в соответствии с выражением

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = I^\lambda(\theta, \varphi) / (V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi))^2. \quad (25)$$

Так, например, время релаксации фононов на границах цилиндрических образцов при $\Delta^\lambda(\theta, \varphi) \leq 1$, как следует из выражения (А6), можно представить в виде

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{4R}{\pi V_{g\perp}^\lambda} \left[1 - \left(1 + (\Delta^\lambda)^2 \right) \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right)^3 + \Delta^\lambda \left(\arccos \Delta^\lambda + \Delta^\lambda \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right) \right], \quad (26)$$

$$\Delta^\lambda = \frac{L}{4R} \frac{V_{g\perp}^\lambda}{|V_{g3}^\lambda|} < 1, \quad V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_{g1}^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}. \quad (27)$$

При выполнении противоположного неравенства $\Delta^\lambda(\theta, \varphi) > 1$ величина $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = 0$. Поэтому $\tau_B^\lambda(\theta, \varphi)$ определяется выражением (14) для цилиндрических образцов бесконечной длины.

Время релаксации фононов на границах для образцов конечной длины с квадратным сечением, как следует из Приложения В, описывается кусочно-непрерывными функциями для различных интервалов углов, определяемых ориентацией градиента температуры относительно кристаллографических осей. При выполнении неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0$, $|V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g2}^\lambda| > |V_{g1}^\lambda|$ и $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0$ оно имеет вид

$$\tau_B^\lambda = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi))^2} = \frac{Dk_0}{|V_{g3}^\lambda|} \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{|V_{g2}^\lambda| + |V_{g1}^\lambda|}{|V_{g3}^\lambda|} + \frac{k_0^2}{3} \frac{|V_{g2}^\lambda| |V_{g1}^\lambda|}{(V_{g3}^\lambda)^2} \right\}. \quad (28)$$

При выполнении противоположных неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0$ при $|V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0$ при $|V_{g2}^\lambda| > |V_{g1}^\lambda|$ величина $\Delta I^\lambda = 0$. В этом случае время релаксации фононов на границах определяется выражением (15), полученным ранее для образцов бесконечной длины. Итак, времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым и квадратным сечениями определяются кусочно-непрерывными функциями.

Нетрудно убедиться, что при достаточно низких температурах, когда применима модель анизотропного континуума, длины свободного пробега фононов при рассеянии на границах Λ_B и соответствующие величины для каждой из ветвей спектра Λ_B^λ для образцов конечной длины могут быть представлены в виде

$$\Lambda_B = \left[\frac{3}{4\pi} \right] \frac{1}{\sum_{\lambda 1} \langle (S^{\lambda 1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda 1} \int_{-1}^1 dx_\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^3}, \quad (29)$$

$$\Lambda_B^\lambda = \left[\frac{3}{4\pi} \right] \frac{1}{\langle (S^\lambda)^{-2} \rangle} \int_{-1}^1 dx_\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^3}. \quad (30)$$

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

Проанализируем угловые зависимости длин свободного пробега фононов при рассеянии на границах для кристаллов кремния при низких температурах. Спектр и групповые скорости фононов определим в системе координат по ребрам куба. Рассмотрим два случая: 1) когда градиент температур вращается в плоскости грани куба XZ ($\varphi = 0$); 2) когда градиент температур вращается в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$). Имеем

$$1) \nabla_r T = \{\nabla_x T, 0, \nabla_z T\} = |\nabla_r T| \{\sin \Phi, 0, \cos \Phi\}, \quad (31)$$

$$2) \nabla_r T = \{\nabla_x T, \nabla_y T, \nabla_z T\} \\ = |\nabla_r T| \{\sin \Phi / \sqrt{2}, \sin \Phi / \sqrt{2}, \cos \Phi\}. \quad (32)$$

Зависимости $\Lambda_B(\Phi)$ от угла Φ будут определяться зависимостями компонент групповой скорости фононов V_{g1}^λ , V_{g2}^λ и V_{g3}^λ , входящих в величины $I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)$ и $I^\lambda(\theta, \varphi)$. Для цилиндрических образцов достаточно задать компоненту групповой скорости фононов, параллельную градиенту температур. Для рассматриваемых случаев вращения градиента температуры в плоскости грани куба или диагональной плоскости имеем

$$1) V_{g3}^\lambda = V_{gx}^\lambda \sin \Phi + V_{gz}^\lambda \cos \Phi, \quad (33)$$

$$2) V_{g3}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \Phi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \Phi. \quad (34)$$

Здесь компоненты групповой скорости $V_{g_{x,y,z}}^\lambda$ определяются формулами (8).

Для образцов с квадратным сечением величина теплопроводности зависит также от ориентации их боковых граней. Для анализа угловых зависимостей выберем ориентацию граней следующим образом. В случае вращения градиента температур в плоскости грани куба XZ ось Y остается стационарной, поэтому одну из боковых граней возьмем перпендикулярной оси Y : $V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda$. В качестве направления V_{g1}^λ возьмем направление, лежащее в плоскости XZ и перпендикулярное градиенту температур,

$$V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda \cos \Phi - V_{gz}^\lambda \sin \Phi. \quad (35)$$

Для случая градиента температур, который вращаем в диагональной плоскости, стационарной осью является направление, перпендикулярное этой плоскости. Поэтому выберем его в качестве направления V_{g2}^λ

$$V_{g2}^\lambda = (V_{gy}^\lambda - V_{gx}^\lambda) / \sqrt{2}. \quad (36)$$

В качестве направления V_{g1}^λ выберем направление, лежащее в диагональной плоскости и перпендикулярное градиенту температур,

$$V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \Phi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \Phi. \quad (37)$$

Рассмотрим сначала угловые зависимости средних длин свободного пробега фононов для образцов бесконечной длины, рассчитанные по формулам (17) и (19). Значения средних длин пробега и длин пробега для

каждой из ветвей фононного спектра мы нормировали на длину Казимира Λ_C : для образцов с квадратным сечением $\Lambda_C = 1.115D$ и для образцов с круглым сечением $\Lambda_C = 2R$. Отметим, что угловые зависимости длин свободного пробега, нормированных на длину Казимира $\tilde{\Lambda}_B(\Phi) = \Lambda_B(\Phi) / \Lambda_C$ и $\tilde{\Lambda}_B^\lambda(\Phi) = \Lambda_B^\lambda(\Phi) / \Lambda_C$, для образцов бесконечной длины с круглым и квадратным сечениями различаются мало: различие для средних длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_B(\Phi)$ не превышает 0.6%. Для рассматриваемых случаев максимальное отклонение длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_B^\lambda(\Phi)$ не превышает 1.1% для быстрой поперечной моды. В масштабе рис. 2 эти кривые не различимы. Поэтому рис. 2

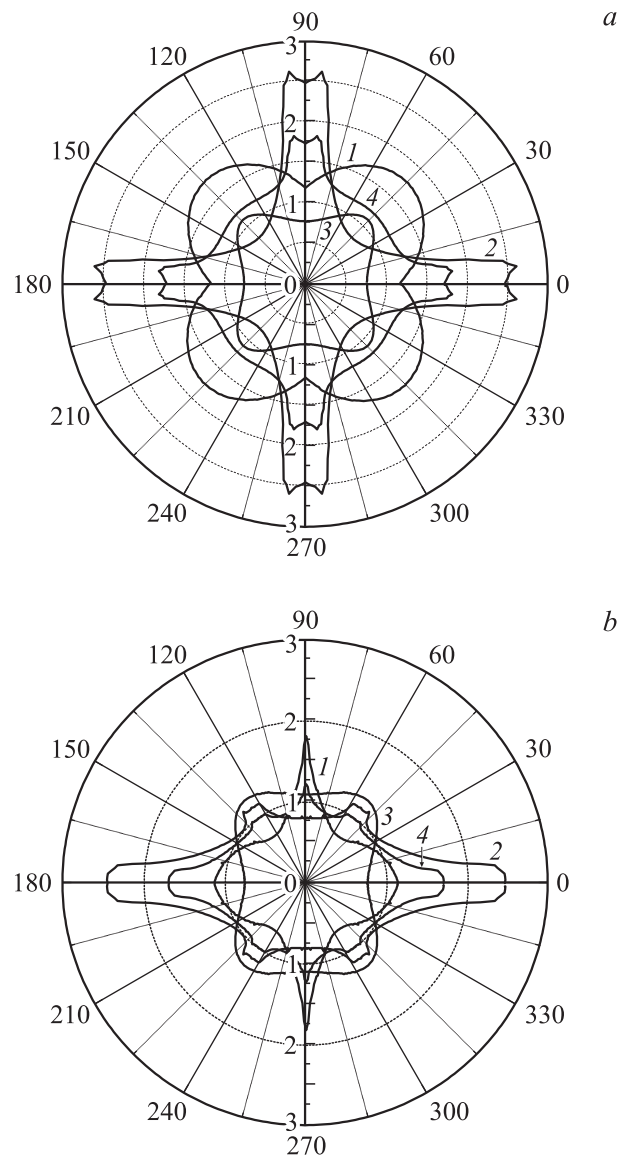


Рис. 2. Угловые зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_B^\lambda(\Phi) = \Lambda_B^\lambda(\Phi) / \Lambda_C$ и $\tilde{\Lambda}_B(\Phi) = \Lambda_C(\Phi) / \Lambda_C$, нормированных на длину Казимира, для образцов бесконечной длины с квадратным сечением в случаях, когда градиент температур лежит в плоскости грани куба (a) и диагональной плоскости (b). 1 — быстрая поперечная мода, 2 — медленная поперечная мода, 3 — продольная мода, 4 — средняя длина свободного пробега.

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

Мода	$\langle (S^\lambda(\theta, \varphi))^{-2} \rangle$, $10^{-12} \text{ s}^{-2} \cdot \text{cm}$	$\bar{S}^\lambda, 10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$	C_V^λ/T^3 , $\text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-4}$	$\bar{S}, 10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$	C_V/T^3 , $\text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-4}$
L	1.2133	9.069	0.545	5.668	5.875
$t1$	3.0805	5.688	2.21		
$t2$	3.8783	5.058	3.21		

Примечание. L — продольная мода, $t1$ — быстрая поперечная, $t2$ — медленная поперечная мода.

относится фактически к образцам бесконечной длины как с круглым, так и с квадратным сечением. В таблице приведены значения параметров, определяющих длины свободного пробега фононов для кристаллов кремния при низких температурах. Как видно из рис. 2, *a*, в направлениях [001] максимального значения средняя длина свободного пробега достигает для медленной поперечной моды. Она в 2 раза больше, чем значение Λ_B^{t1} , и в 3 раза больше, чем Λ_B^L для продольных фононов. При переходе к направлению [101] ситуация меняется: длина свободного пробега для медленной поперечной моды уменьшается в 3 раза и имеет минимальное значение. Максимальное значение длина свободного пробега имеет для быстрой поперечной моды. Она больше в 2.8 и 1.6 раза, чем для медленных поперечных и продольных фононов соответственно. Для направления [111] максимальное значение длина свободного пробега имеет для продольных фононов. Она больше в 1.8 и 1.1 раза, чем для быстрых и медленных поперечных фононов соответственно (рис. 2, *b*).

Следует отметить, что теория [6] является приближенной. Рассчитанные величины теплопроводности кремния $\kappa_{\text{theor}}(T_0)$ превышают экспериментальные значения $\kappa_{\text{exp}}(T_0)$ для направлений типа [001] на 4%, а для [101] и [111] — на 8%. Поэтому имеет смысл ввести в теорию [6] подгоночный параметр, определив его из условия равенства теоретических и экспериментальных значений теплопроводности $\kappa_{\text{theor}}(T_0) = \kappa_{\text{exp}}(T_0)$ при $T_0 = 3 \text{ K}$ для направления оси стержня [001] и ориентации боковых граней вдоль направлений [100] и [010]. Первое соображение, которое может возникнуть для объяснения этого расхождения, — расхождение условий эксперимента и теоретических предположений, положенных в основу теории [6]. В теории [6] реальный образец конечной длины заменялся эквивалентным отрезком бесконечного кристалла с однородным распределением градиента температуры (см. рис. 6 в [6]). В условиях эксперимента [6] для образцов с квадратным сечением $D = 0.293 \text{ cm}$, а геометрическая длина первого образца равнялась 3.2 см, а трех остальных — 3.7 см. Нагреватель приклеивался прямо к торцу образца, а противоположный конец зажимался в хладостоке. Расстояние от нагревателя до хладостока равнялось 2.9 см (в теории это расстояние L), т.е. параметр $d_L = D/L \approx 0.101$. Длина хладостока могла составлять от 0.2 см для первого образца до 0.8 см для остальных. Таким образом, в условиях эксперимента [6]

предположение об однородности потока тепла и градиента температуры для образцов конечных размеров не выполнялось, по крайней мере в окрестности хладостока (см. рис. 6 в [6]). Тепло должно выделяться на боковых гранях образца на длине хладостока ΔL . Во-первых, кроме продольного градиента температуры должны возникать поперечные компоненты градиента температуры. Во-вторых, возникает неопределенность относительно эффективной длины образца L_{eff} , которая должна удовлетворять неравенству $L < L_{\text{eff}} < L + \Delta L$. Если бы градиент температуры простирался внутрь хладостока, то эффективная длина в этом случае была бы больше, чем геометрическое расстояние между нагревателем и хладостоком. В этом случае эффективное значение параметра $d_L^{\text{eff}} = D/L_{\text{eff}}$ должно быть меньше геометрического значения $d_L \approx 0.101$. Однако численный расчет этого варианта подгонки с использованием выражения (33) дает значение $d_L \approx 0.114$, что больше, чем геометрическая величина $d_L \approx 0.101$. Таким образом, этот вариант не может быть использован для согласования теории и результатов эксперимента [6].

При количественном сравнении данных теоретических расчетов с экспериментальными данными, когда масштаб отклонений составляет не более 10%, для формулировки корректных выводов важным становится учет ряда деталей эксперимента, которыми в иных обстоятельствах можно пренебречь. Так, в случае граничного рассеяния важно корректно определить размеры сечения образца, в котором имеется тепловой поток. Эти размеры могут быть заметно меньше геометрических размеров образца. Такая ситуация может возникнуть при обработке поверхности образцов с целью обеспечения диффузного характера рассеяния фононов. Мак-Карди и др. [6] шлифовали поверхность образцов кремния с использованием наждака на основе корунда со средним размером частиц около 70–80 μm . При такой обработке непосредственно под поверхностью образцов формируется сильно дефектный слой материала, включающий микротрещины с соответствующими полями деформаций и сеть дислокаций [18]. При этом толщина дефектного слоя под поверхностью образцов может достигать нескольких средних размеров частиц абразива. Есть веские экспериментальные основания (см. [19]) считать, что незеркальные отражения фононов происходят преимущественно в этом дефектном слое и кажущаяся граница, на которой рассеиваются фононы, расположена в поврежденной области [7], а не на геометрической поверхности образца. В связи

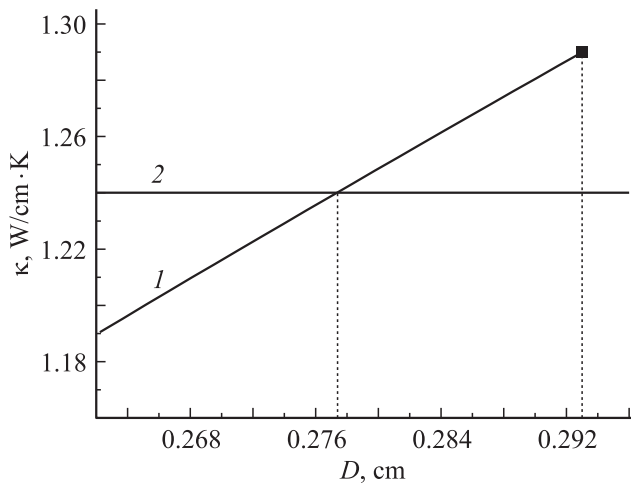


Рис. 3. Зависимость теплопроводности от длины стороны D стержня квадратного сечения при температуре 3 К (1), рассчитанная для стержня с осью в направлении [001] и с боковыми гранями в направлениях [100] и [010]. Горизонтальная линия 2 — экспериментальное значение теплопроводности. Геометрическая ширина $D_g = 0.293$ см.

с этим при подгонке результатов расчета под экспериментальные данные следует использовать параметр эффективной ширины образца $D_{\text{эф}}$. Из условия равенства $\kappa_{\text{теор}}(T_0) = \kappa_{\text{эксп}}(T_0)$ при $T_0 = 3$ К для направления [001] и ориентации боковых граней вдоль направлений [100] и [010] находим $D_{\text{эф}} = 0.278$ см (рис. 3). В результате для толщины дефектного слоя под поверхностью образца находим $\Delta D = \{D - D_{\text{эф}}\}/2 = 0.0075$ см, что практически совпадает с диаметром частиц абразива в [6]. Таким образом, полученный результат для толщины дефектного слоя и эффективной ширины образца $D_{\text{эф}}$ согласуется с приведенными выше представлениями о дефектном слое. Для образцов конечной длины при расчете длин свободного пробега фононов будем использовать найденное значение параметра $D_{\text{эф}} = 0.278$ см. В этом случае результаты расчета теплопроводности и длин свободного пробега фононов для направления [001] совпадают с экспериментальными данными, а для остальных симметричных направлений отклонение результатов расчета от экспериментальных данных [6] оказывается менее погрешности эксперимента (4%) (рис. 4). Как видно из сравнения рис. 2, *a* и 4, *a*, для образцов конечной длины с квадратным сечением анизотропия средних длин свободного пробега уменьшается. Это согласуется с результатами работы [10]. Так, например, для фононов быстрой поперечной моды длина свободного пробега становится почти изотропной. В плоскости грани куба (рис. 4, *a*) изменение составляет менее 10%. Наиболее интересным результатом нашего анализа является связь максимальных значений длин свободного пробега фононов и направлений фокусировки.

Из рис. 4 видно, что длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях ее фокусировки,

причем в этих направлениях они превосходят длины пробега для остальных колебательных мод. Так, например, фононы медленной поперечной моды фокусируются в направлении [001], и их длина свободного пробега превосходит длины пробега фононов быстрой поперечной и продольной мод в 1.63 и 2.36 раза соответственно, а среднюю длину свободного пробега фононов в 1.3 раза. Фононы быстрой поперечной моды фокусируются в направлении [101], и их длина свободного пробега имеет максимальное значение. Она превосходит в этом направлении длины свободного пробега фононов мед-

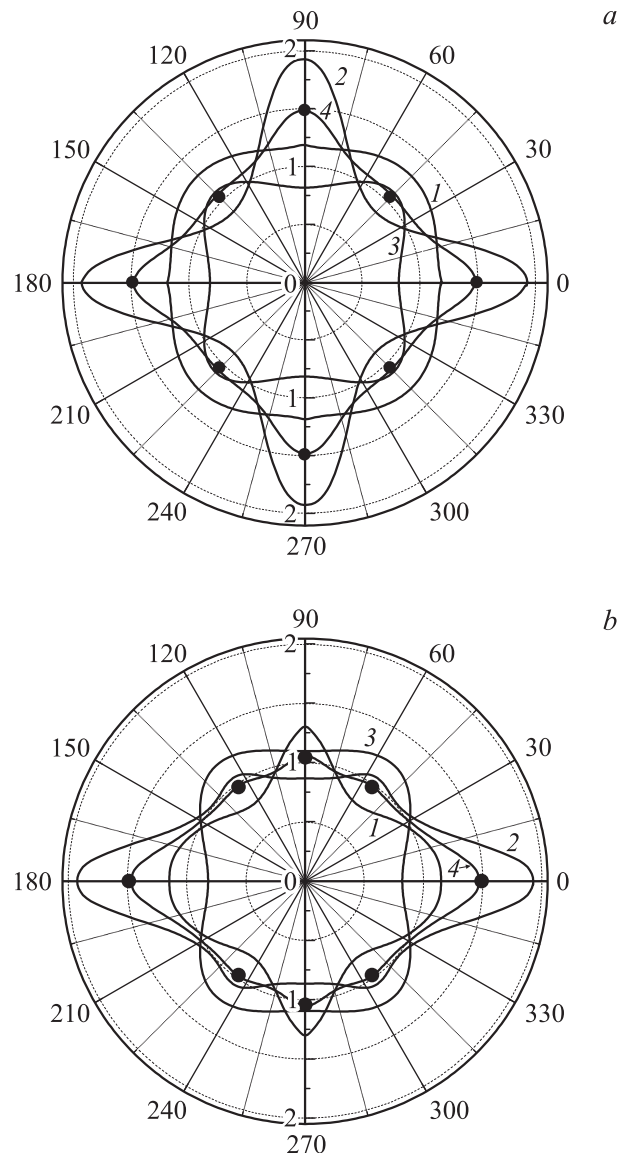


Рис. 4. Угловые зависимости длин свободного пробега $\Lambda_B(\Phi) = \Lambda_B^2(\Phi)/D_{\text{эф}}$ и $\Lambda_B(\Phi) = \Lambda_B(\Phi)/D_{\text{эф}}$, нормированных на эффективную ширину образца $D_{\text{эф}} = 0.278$ см, для образцов конечной длины с квадратным сечением в случаях, когда градиент температур вращается в плоскости грани куба (*a*) и диагональной плоскости (*b*). 1 — быстрая поперечная мода, 2 — медленная поперечная мода, 3 — продольная мода, 4 — средняя длина свободного пробега. Точки — экспериментальные значения средних длин свободного пробега [6].

ленной поперечной моды в 1.5 раза, продольной моды — в 1.19 раза, а среднюю длину пробега — в 1.22 раза. Продольные фононы фокусируются в направлении [111], для этого направления их длина свободного пробега заметно превышает длины свободного пробега быстрых и медленных поперечных фононов. В этом направлении длины свободного пробега фононов медленной и быстрой поперечных мод уменьшаются относительно направления [001] в 1.82 и 1.52 раза соответственно, в то время как для продольной моды Λ_B^L возрастает в 1.51 раза. В результате длина свободного пробега продольных фононов оказывается больше в 1.58 и 1.16 раза, чем для быстрых и медленных поперечных фононов. В этом направлении она превосходит среднюю длину свободного пробега фононов в 1.26 раза.

5. Заключение

Рассмотрена фокусировка фононов в кубических кристаллах, а также ее влияние на релаксационные характеристики фононного газа в режиме граничного рассеяния. Рассчитаны времена релаксации фононов различных поляризаций на границах для образцов бесконечной и конечной длины с круглым и квадратным сечениями. Показано, что они определяются кусочно-непрерывными функциями. Рассмотрены случаи образцов бесконечной и конечной длины с круглым и квадратным сечениями. Получены простые формулы, позволяющие не только рассчитывать релаксационные параметры фононов с учетом фокусировки для кубических кристаллов, но и анализировать температурные зависимости теплопроводности в широком температурном интервале. Проанализирована анизотропия длин свободного пробега фононов для кристаллов кремния при низких температурах. Для образцов бесконечной длины с круглым и квадратным сечениями в случае равенства площадей поперечных сечений угловые зависимости длин свободного пробега, нормированных на длину Казимира, почти совпадают. Рассмотрены угловые зависимости длин свободного пробега в условиях, когда градиент температур расположен в плоскости грани куба и когда он расположен в диагональной плоскости. Показано, что при переходе от образцов бесконечной длины к образцам конечной длины анизотропия длин свободного пробега фононов и соответственно теплопроводности заметно уменьшается.

Установлено, что длины свободного пробега фононов каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод. Так, например, фононы медленной поперечной моды фокусируются в направлении [001], и их длина свободного пробега значительно превосходит длины свободного пробега для фононов остальных акустических мод, а также среднюю длину свободного пробега фононов. Фононы быстрой поперечной моды фокусируются в направлении [101], и их длина свободного пробега превосходит длины пробега для

остальных акустических мод. Продольные фононы фокусируются в направлении [111], для этого направления их длина свободного пробега заметно превышает длины свободного пробега быстрых и медленных поперечных фононов.

В дальнейшем мы планируем применить развитую теорию для анализа температурных зависимостей теплопроводности кубических кристаллов. Актуальной проблемой является также исследование влияния дисперсии тепловых фононов на фокусировку фононов и анизотропию теплопроводности в режиме граничного рассеяния.

Приложение А. Вычисление контурного интеграла для образцов конечной длины с круглым сечением

Рассмотрим вычисление интеграла по контуру для цилиндрических образцов конечной длины

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

при $|\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq \frac{L}{2}$. (A1)

На рис. 5 показано сечение цилиндра плоскостью, перпендикулярной его оси. Радиус цилиндра обозначим R . Фонон покидает элемент поверхности в точке X_1 в направлении вектора групповой скорости \mathbf{V}_g^λ . Проекция этого вектора на секущую плоскость есть вектор $V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}$, где V_{g3}^λ — проекция групповой скорости на ось цилиндра. Обозначим через $\Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ проекцию длины свободного пробега фононов на плоскость сечения. На рис. 5 она равна длине отрезка X_1A . Проекция длины свободного пробега $\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})$

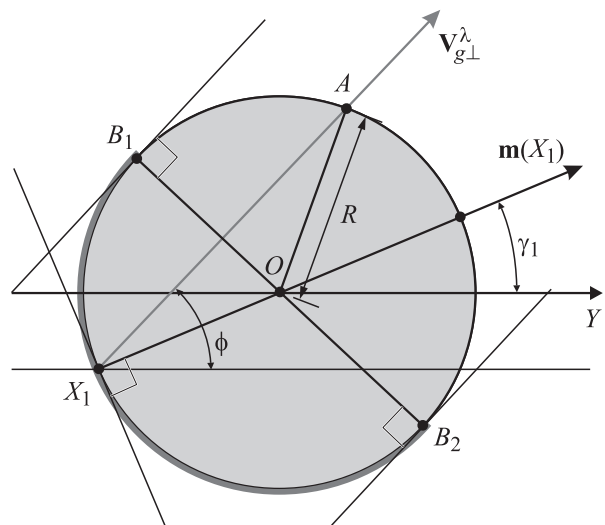


Рис. 5. Схема, иллюстрирующая вычисление контурного интеграла для цилиндрических образцов (показано сечение цилиндра плоскостью, перпендикулярной его оси).

и $\Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ связаны соотношением

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda} \Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q}), \quad V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_{g1}^\lambda)^2 + (V_{g2}^\lambda)^2}. \quad (\text{A2})$$

Введем угол γ_1 между осью \mathbf{Y} и нормалью к окружности $\mathbf{n}(X_1)$ в точке X_1 , а также угол ϕ между вектором $\mathbf{V}_{g\perp}^\lambda$ и осью \mathbf{Y} . Из геометрии рисунка следует, что

$$\Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = 2R \cos(\phi - \gamma_1),$$

тогда

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

$$(\mathbf{m}(X_1, \mathbf{V}_g^\lambda)) = V_{g\perp}^\lambda \cos(\phi - \gamma_1). \quad (\text{A3})$$

Для образца с круглым сечением полагаем $dX_1 = R d\gamma_1$. Вклад в контурный интеграл (A1) вносят 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 B_1 и B_2 (сектор выделен жирной линией на рис. 5). Соответствующие значения углов γ_1 для бесконечного образца ограничены значениями $-\pi/2 < \gamma_1 - \phi < \pi/2$. Для бесконечного образца без труда находим

$$I_\lambda^\infty = \frac{4R^3}{2S_c} \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{V_{g\perp}^\lambda} \int_{X_1} \cos^3(\phi - \gamma_1) d\gamma_1 = \frac{8R}{3\pi} \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{V_{g\perp}^\lambda}. \quad (\text{A4})$$

Для цилиндрического образца конечной длины при вычислении контурного интеграла (A1) мы должны учесть условие $|\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq L/2$. Подстановка (A3) в это неравенство дает

$$\Delta^\lambda = \frac{L}{4R} \frac{V_{g\perp}^\lambda}{|V_{g3}^\lambda|} < 1. \quad (\text{A5})$$

Вычисление интеграла (A1) дает

$$\Delta I^\lambda(\theta, \phi) = \frac{3}{2} I_\lambda^\infty(\theta, \phi) \left[(1 + (\Delta^\lambda)^2) \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right)^3 - \Delta^\lambda \left(\arccos \Delta^\lambda + \Delta^\lambda \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right) \right]. \quad (\text{A6})$$

Приложение В. Вычисление контурного интеграла для образцов конечной длины с квадратным сечением

Рассмотрим стержень (длиной L) с квадратным сечением (длина стороны равна D) (рис. 6). Пусть V_{g3}^λ — проекция групповой скорости на направление градиента температуры, которое совпадает с осью стержня, $V_{g\perp}^\lambda$ — проекция групповой скорости на плоскость сечения

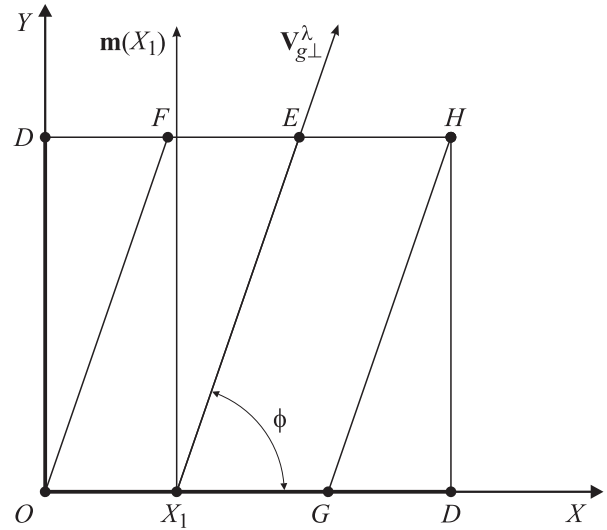


Рис. 6. Схема, иллюстрирующая вычисление контурного интеграла для образца с квадратным сечением. Показано сечение плоскостью, перпендикулярной его длинной оси, для $\text{tg } \phi = |V_{g2}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda| > 1$.

стержня, а V_{g1}^λ и V_{g2}^λ — проекции групповой скорости на боковые грани образца. На рис. 6 изображен случай, когда $\text{tg } \phi = |V_{g2}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda| > 1$. При вычислении интеграла по контуру (A1) выделим три области: область А — треугольник с вершинами ODF , область В — параллелограмм $OFHG$, область С — треугольник GHD (рис. 6). Здесь следует обратить внимание на одну тонкость расчета, которая следует из физики этой задачи. Как следует из выражений (9), (21), (22) и (A1), указанные в них контурные интегралы по dX_1 вычисляются не по всему контуру, а захватывают только его половину. Дело в том, что при диффузном рассеянии фонона на границе для фиксированного угла ϕ мы должны интегрировать по dX_1 только по тем сторонам сечения образца, где скорость фонона направлена внутрь образца (жирные линии на рис. 5 и 6). Обозначим через $\Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ 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 $\Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ соотношением

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q}) (V_{g3}^\lambda/V_{g\perp}^\lambda). \quad (\text{B1})$$

Для области А имеем

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

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \Lambda_1^\lambda(X_1, \mathbf{q}) \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda}. \quad (\text{B2})$$

Из условия $|\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq L/2$ следует, что

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \frac{D - y}{\sin \phi} \frac{|V_{g3}^\lambda|}{|V_{g\perp}^\lambda|} \geq \frac{L}{2}.$$

Из этого неравенства можно получить ограничение на область интегрирования

$$0 \leq y \leq y_{\max} = D - \frac{L}{2} \frac{V_{g\perp}^\lambda \sin \phi}{|V_{g3}^\lambda|} = D \left(1 - k_0 \frac{|V_{g2}^\lambda|}{|V_{g3}^\lambda|} \right),$$

$$k_0 = \frac{L}{2D}. \quad (\text{B3})$$

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

$$\Delta I^\lambda(A) = \frac{D}{2} \left\{ \frac{(V_{g3}^\lambda)^2 \cos \phi}{3|V_{g\perp}^\lambda| \sin^2 \phi} - k_0 |V_{g3}^\lambda| \frac{\cos \phi}{\sin \phi} + k_0^2 |V_{g\perp}^\lambda| \cos \phi - k_0^3 \frac{(V_{g\perp}^\lambda)^2 \cos \phi \sin \phi}{|V_{g3}^\lambda|} \right\}. \quad (\text{B4})$$

Из условия $y_{\max} > 0$ следует неравенство $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0$. Нетрудно убедиться, что при интегрировании по областям В и С из условия $\Lambda_3^\lambda \geq L/2$ следует то же самое неравенство. Непосредственный расчет интегралов по областям В и С дает

$$\Delta I^\lambda(B) = \frac{D}{2} \left\{ \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{|V_{g\perp}^\lambda|} \frac{1}{\sin \phi} - 2k_0 |V_{g3}^\lambda| + k_0^2 |V_{g\perp}^\lambda| \sin \phi \right\} \times (1 - \text{ctg} \phi), \quad \Delta I_\lambda^L(C) = \Delta I_\lambda^L(A). \quad (\text{B5})$$

Просуммируем по всем трем областям и учтем, что $\text{tg} \phi = |V_{g2}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda|$, тогда получим

$$\Delta I^\lambda = \frac{D}{6} \left(\frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g2}^\lambda} \right)^2 (3|V_{g2}^\lambda| - |V_{g1}^\lambda|) - Dk_0 |V_{g3}^\lambda| + \frac{Dk_0^2}{2} (|V_{g2}^\lambda| + |V_{g1}^\lambda|) - \frac{Dk_0^3}{3} \frac{|V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{|V_{g3}^\lambda|}, \quad \left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g2}^\lambda} \right| \geq k_0. \quad (\text{B6})$$

Аналогично рассматривается случай $\text{tg} \phi = |V_{g2}^\lambda|/|V_{g1}^\lambda| < 1$:

$$\Delta I^\lambda = \frac{D}{6} \left(\frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g1}^\lambda} \right)^2 (3|V_{g1}^\lambda| - |V_{g1}^\lambda|) - Dk_0 |V_{g3}^\lambda| + \frac{Dk_0^2}{2} (|V_{g2}^\lambda| + |V_{g1}^\lambda|) - \frac{Dk_0^3}{3} \frac{|V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{|V_{g2}^\lambda|}, \quad \left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g1}^\lambda} \right| \geq k_0. \quad (\text{B7})$$

Учитывая выражения (11), (B6) и (B7), при выполнении неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0$ и $|V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0$ и $|V_{g2}^\lambda| > |V_{g1}^\lambda|$ для функции $I^\lambda(\theta, \varphi)$ находим

$$I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) - \Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = Dk_0 |V_{g3}^\lambda| \times \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{|V_{g2}^\lambda| + |V_{g1}^\lambda|}{|V_{g3}^\lambda|} + \frac{k_0^2}{3} \frac{|V_{g2}^\lambda| |V_{g1}^\lambda|}{(V_{g3}^\lambda)^2} \right\}. \quad (\text{B8})$$

Если выполняются противоположные неравенства $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0$ при $|V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0$ при $|V_{g2}^\lambda| > |V_{g1}^\lambda|$, то функция $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = 0$. В этом случае функция $I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)$, и она определяется выражением (11), полученным ранее для образцов бесконечной длины.

Список литературы

- [1] D.G. Cahill, W. K. Ford, K.E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin, S.R. Phillpot. *J. Appl. Phys.* **93**, 793 (2003).
- [2] A.D. McConnell, K.E. Goodson. *Ann. Rev. Heat Transfer* **14**, 128 (2005).
- [3] H.B.G. Casimir. *Physica (Amsterdam)* **5**, 595 (1938).
- [4] R. Berman, F.E. Simon, J.M. Ziman. *Proc. R. Soc. Lond. A* **220**, 171 (1953).
- [5] R. Berman, E.L. Foster, J.M. Ziman. *Proc. R. Soc. Lond. A* **231**, 130 (1955).
- [6] A.K. McCurdy, H.J. Maris, C. Elbaum. *Phys. Rev. B* **2**, 4077 (1970).
- [7] J.P. Harrison, J.P. Pendry. *Phys. Rev. B* **7**, 3902 (1973).
- [8] M.N. Wybourne, C.G. Eddison, M.J. Kelly. *J. Phys. C* **17**, L607 (1984); C.G. Eddison, M.N. Wybourne. *J. Phys. C* **18**, 5225 (1985).
- [9] Z. Wang, N. Mingo. *Appl. Phys. Lett.* **99**, 101903 (2011).
- [10] A.K. McCurdy. *Phys. Rev. B* **26**, 6971 (1982).
- [11] И.Г. Кулеев. *ФТТ* **42**, 979 (2000); *ФТТ* **44**, 215 (2002).
- [12] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. *ФТТ* **49**, 422 (2007).
- [13] I.G. Kuleyev, I.I. Kuleyev, I.Yu. Arapova. *J. Phys.: Cond. Matter* **20**, 465201 (2008).
- [14] J.J. Hall. *Phys. Rev.* **161**, 756 (1967).
- [15] P. Carruthers. *Rev. Mod. Phys.* **33**, 92 (1961).
- [16] Б.М. Могилевский, А.Ф. Чудновский. *Теплопроводность полупроводников*. Наука, М. (1972). 536 с.
- [17] Y.P. Joshi. *Pramana* **18**, 461 (1982).
- [18] H. Lundt, M. Kerstan, A. Huber, P.O. Hahn. *Proc. of 7th Int. Symp. on silicon materials science and technology*. The Electrochemical Society, Pennington. N.J. (1994). V. 94-10. P. 218.
- [19] M.P. Zaitlin, L.M. Scherr, A.C. Anderson. *Phys. Rev. B* **12**, 4487 (1975).