

## Влияние дисперсии на фокусировку фононов и анизотропию теплопроводности монокристаллов кремния в режиме граничного рассеяния

© И.И. Кулеев<sup>1</sup>, И.Г. Кулеев<sup>1</sup>, С.М. Бахарев<sup>1</sup>, А.В. Инюшкин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики металлов УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> НИЦ „Курчатовский институт“,  
Москва, Россия

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 26 декабря 2012 г.)

Исследовано влияние дисперсии на фокусировку тепловых фононов и теплопроводность кристаллов кремния в режиме граничного рассеяния. Анализ спектров акустических мод, полученных для кристаллов кремния из данных по неупругому рассеянию нейтронов, показал, что при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам изменяются направления их фокусировки. Это приводит к изменению анизотропии теплопроводности фононов различных поляризаций с увеличением температуры и соответственно к изменению анизотропии полной теплопроводности. Анализ температурной зависимости теплопроводности показал, что наличие протяженных плоских участков спектра поперечных коротковолновых фононов приводит к аномально низким значениям групповой скорости и соответственно к значительному уменьшению их вклада в теплопроводность с повышением температуры. При этом вклад продольных фононов в теплопроводность существенно возрастает и при температурах, больших 110 К становится доминирующим.

Работа выполнена по плану РАН в рамках темы № 01.2.006.13395 при поддержке программы ОФН РАН (грант № 12-T-2-1018), а также гранта ведущей научной школы НШ-6172.2012.2 и фонда „Династия“.

### 1. Введение

Фокусировка фононов в упругоанизотропных кристаллах исследовалась в работах [1–6]. При достаточно низких температурах, когда длина свободного пробега фононов превышает поперечный размер образца, она приводит к анизотропии теплопроводности. Исследование теплопроводности кубических кристаллов Si и CaF<sub>2</sub> показало, что в режиме граничного рассеяния (ниже максимума) теплопроводность оказывается выше в тех направлениях, где имеет место фокусировка фононов [1]. Выше максимума, когда длина свободного пробега становится меньше поперечных размеров образца, теплопроводность кристаллов становилась изотропной. Полученные для теплопроводности результаты [1] интерпретировались в рамках теории Казимира [7], обобщенной на случай упругоанизотропных кристаллов. Авторам [1] не удалось определить времена релаксации для диффузного рассеяния фононов на границах образца. Для расчета температурных зависимостей теплопроводности в рамках релаксационного метода [8–10] необходимо определить времена релаксации фононов для всех актуальных механизмов рассеяния и найти полное время релаксации согласно правилу Маттиссена. Ввиду отсутствия таких расчетов за последние сорок лет не было опубликовано ни одной работы, в которой бы анализировались температурные зависимости теплопроводности диэлектрических кристаллов с учетом фокусировки фононов. Такой расчет удалось выполнить в работе [11].

Это позволило определить времена релаксации фононов на границах для образцов конечной длины с круглым и квадратным сечениями в виде кусочно-непрерывных функций для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами образца.

В настоящей работе результаты [11] используются для исследования влияния дисперсии тепловых фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности в режиме граничного рассеяния. Из данных по неупругому рассеянию нейтронов [12–13] следует, что при переходе от длинноволновых фононов к коротковолновым анизотропия спектра таких кубических кристаллов, как Ge и Si, существенно меняется. Нами показано, что при этом будут изменяться направления фокусировки фононов и соответственно анизотропия полной теплопроводности с повышением температуры. Еще одним эффектом, к которому приводит учет дисперсии, является изменение соотношения вкладов поперечных и продольных фононов в теплопроводность с повышением температуры. Как указывалось еще Холландом [14], наличие значительных плоских участков спектра поперечных коротковолновых фононов в области значений волнового вектора  $q_{\max}/2 < q < q_{\max}$  ( $q_{\max}$  — максимальный волновой вектор) должно приводить к аномально низким значениям групповой скорости и соответственно к уменьшению их вклада в теплопроводность с повышением температуры. Оценки [15,16], проведенные без учета дисперсии тепловых фононов, показали, что в ин-

тервале температур от 4 до 200 К доминирующий вклад (до 80%) в теплопроводность кристаллов Ge и Si вносят поперечные фононы. Далее показано, что при учете дисперсии вклад продольных фононов в теплопроводность кремния возрастает с увеличением температуры и при  $T > 110$  К становится больше вклада поперечных мод.

Хотя для исследованных в [1] образцов Si режим граничного рассеяния ограничен температурами  $T \sim 25$  К, мы распространили анализ до температур  $T \sim 200$  К. Сделано это для того, чтобы изучить влияние изменений в спектре колебательных мод при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам на анизотропию и температурную зависимость теплопроводности кристаллов Si. С другой стороны, представленный в работе анализ теплопроводности может стать актуальным при переходе от образцов с поперечными размерами порядка нескольких миллиметров к нанобъектам [17–19]. Отметим, что для кремниевых нанопроводов рассеяние фононов на поверхности образцов оказывается существенным вплоть до комнатных температур [17]. Очевидно, что при расчетах теплопроводности нанопроводов необходимо учитывать дисперсию спектра и изменение направлений фокусировки. Для анализа влияния дисперсии на теплопроводность кристаллов Si воспользуемся методом аппроксимации экспериментального спектра фононов [20]. Этот метод заключается в использовании степенного разложения по приведенному волновому вектору фононов  $x$  ( $x = q/q_{\max}$ ) при аппроксимации спектра для симметричных направлений и разложения по кубическим гармоникам для экстраполяции спектра на всю зону Бриллюэна.

## 2. Аппроксимация спектра и фокусировка тепловых фононов в кристаллах Si

В выполненных к настоящему времени экспериментальных исследованиях спектр фононов в кубических кристаллах измерялся, как правило, только в симметричных направлениях [12–13]. Для анализа скоростей релаксации фононов и температурных зависимостей теплопроводности 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  $q_d$ . Проведем экстраполяцию фононного спектра для кристаллов кремния на всю зону Бриллюэна, основываясь на данных по неупругому рассеянию нейтронов [13]. Для этого представим его в виде

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

$$f^\lambda(x, \theta, \varphi) = A^\lambda(\theta, \varphi)x^2 - B^\lambda(\theta, \varphi)x^4 + C^\lambda(\theta, \varphi)x^6 - \dots \quad (1)$$

Здесь функция  $f^\lambda(x, \theta, \varphi)$  описывает дисперсию тепловых фононов,  $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$  — фазовая скорость,  $\theta$  и  $\varphi$  —

угловые переменные вектора  $\mathbf{q}$ , коэффициенты  $A^\lambda(\theta, \varphi)$ ,  $B^\lambda(\theta, \varphi)$ ,  $C^\lambda(\theta, \varphi)$  характеризуют угловые зависимости спектра фононов,  $x = q/q_{\max}$  — приведенный волновой вектор, а  $q_{\max}(\theta, \varphi)$  — максимальный волновой вектор на границе зоны Бриллюэна. Для симметричных направлений он имеет вид

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

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

где  $a$  — постоянная решетки (для кремния  $a = 5.431$  Å). Величина  $q_{\max}(\theta, \varphi)$  на границе зоны Бриллюэна, может быть определена следующими соотношениями:

$$q_1(\theta, \varphi) = \frac{q_{\max}^{[001]}}{|n_1|}, \quad q_2(\theta, \varphi) = \frac{q_{\max}^{[001]}}{|n_2|},$$

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

$$q_{\max}(\theta, \varphi) = \min\{q_1(\theta, \varphi), q_2(\theta, \varphi), q_3(\theta, \varphi), q_4(\theta, \varphi)\}, \quad (3)$$

где  $n_1, n_2, n_3$  — компоненты вектора  $\mathbf{n} = \mathbf{q}/q = (n_1, n_2, n_3) = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ . В длинноволновом пределе  $x \ll 1$  можно положить  $f^\lambda(x, \theta, \varphi) = 0$ . Тогда аппроксимация (1) переходит в модель анизотропного континуума, в которой анизотропия спектра определяется фазовой скоростью  $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$ . В системе координат с осями, направленными по ребрам куба, она определена в [21] (см. также [11], формула (2)). Фазовая скорость  $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$  в кубических кристаллах определяется тремя модулями упругости второго порядка  $c_{11}, c_{12}$  и  $c_{44}$ . Их значения для Si при  $T = 4.2$  К возьмем из работы [22]. Индексы поляризации фононов  $\lambda$  выберем следующим образом: индекс  $L$  соответствует продольным фононам, а  $t_1$  и  $t_2$  — „быстрой“ (верхней) и „медленной“ (нижней) поперечным колебательным модам.

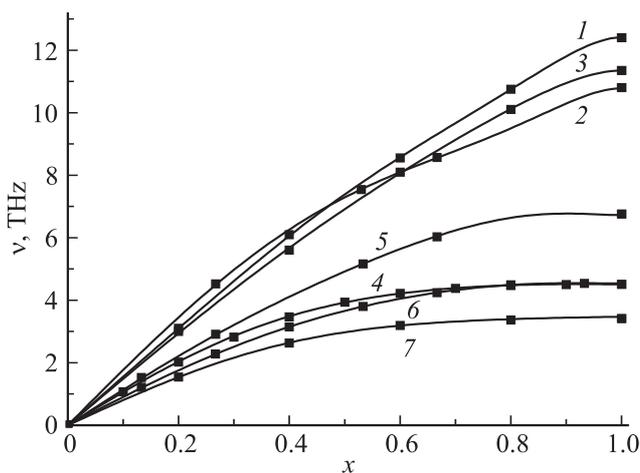
Аппроксимация экспериментального спектра производится в два этапа. На первом этапе мы аппроксимируем экспериментально измеренный спектр фононов для симметричных направлений, используя разложение по степеням приведенного волнового вектора. Для этого зафиксируем углы  $\theta_j$  и  $\varphi_j$ , соответствующие симметричным направлениям ([100], [110] или [111]), и, используя разложение экспериментального спектра по степеням приведенного волнового вектора, найдем коэффициенты  $A^\lambda(\theta_j, \varphi_j)$ ,  $B^\lambda(\theta_j, \varphi_j)$  и  $C^\lambda(\theta_j, \varphi_j)$  для каждой акустической моды. Значения этих коэффициентов представлены в табл. 1. Как видно из рис. 1, аппроксимация спектра фононов в кристаллах Si полиномом седьмой степени достаточно хорошо воспроизводит экспериментальные данные для всех колебательных мод в симметричных направлениях. Усредненная погрешность этой аппроксимации для продольных фононов составляет 0.9%, а для поперечных — 1.3%. Как явствует из табл. 1, влияние дисперсии на спектр продольных фононов максимально

**Таблица 1.** Параметры, определяющие экстраполяцию спектра фононов, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов [13], на всю зону Бриллюэна

Продольная мода			Поперечные моды				
$A_{[001]}^L$	0.27	$a_1^L$	9.60	$A_{[001]}^L$	1.35	$a_1^{L1}$	-1.91
$B_{[001]}^L$	0.13	$a_2^L$	-77.67	$B_{[001]}^L$	1.22	$a_2^{L1}$	17.25
$C_{[001]}^L$	0.064	$b_1^L$	18.21	$C_{[001]}^L$	0.45	$b_1^{L1}$	-1.63
$A_{[101]}^L$	0.91	$b_2^L$	-129.44	$A_{[101]}^L$	0.71	$b_2^{L1}$	14.94
$B_{[101]}^L$	0.72	$c_1^L$	8.86	$B_{[101]}^L$	0.72	$c_1^{L1}$	-0.26
$C_{[101]}^L$	0.21	$c_2^L$	-30.51	$C_{[101]}^L$	0.43	$c_2^{L1}$	2.66
$A_{[111]}^L$	0.35			$A_{[101]}^2$	0.90	$a_1^{L2}$	-1.34
$B_{[111]}^L$	0.30			$B_{[101]}^2$	0.56	$a_2^{L2}$	12.12
$C_{[111]}^L$	0.18			$C_{[101]}^2$	0.16	$b_1^{L2}$	-2.18
				$A_{[111]}^L$	1.35	$b_2^{L2}$	19.81
				$B_{[111]}^L$	1.23	$c_1^{L2}$	-2.56
				$C_{[111]}^L$	0.46	$c_2^{L2}$	23.44

в направлении [101] и минимально в направлении [001]: коэффициент  $A_{[101]}^L$ , характеризующий роль дисперсии при  $x \ll 1$  в направлении [101], превосходит коэффициенты  $A_{[001]}^L$  и  $A_{[111]}^L$  в 3.4 и 2.6 раза соответственно. Заметим, что анизотропия и эффекты, связанные с дисперсией, для продольных фононов в Si значительно меньше, чем для поперечных. Для поперечных мод в Si  $0.5 \leq x \leq 1$  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 [12,13].

На втором этапе мы экстраполируем спектр фононов, измеренный для симметричных направлений, на всю



**Рис. 1.** Зависимости спектра продольных (кривые 1–3) и поперечных (кривые 4–7) фононов от приведенного волнового вектора  $x = q/q_{max}$  при аппроксимации экспериментальных данных [13] полиномом седьмой степени для различных симметричных направлений: 1, 4 — [001]; 2, 5, 6 — [110] (5 — быстрая поперечная мода, 6 — медленная); 3, 7 — [111]. Символы — экспериментальные данные [13].

зону Бриллюэна, используя разложение по кубическим гармоникам аналогично тому, как это сделано в работах [20,21]. В работе [21] показано, что 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. [21], рис. 2). Аналогично [20,21] 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  $\eta(\theta, \varphi)$

$$A^\lambda(\theta, \varphi) = A_{[001]}^\lambda \{ 1 + a_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + a_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) \},$$

$$\xi(\theta, \varphi) = n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2,$$

$$\eta(\theta, \varphi) = n_1^2 n_2^2 n_3^2,$$

$$B^\lambda(\theta, \varphi) = B_{[001]}^\lambda \{ 1 + b_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + b_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) \},$$

$$C^\lambda(\theta, \varphi) = C_{[001]}^\lambda \{ 1 + c_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + c_2^\lambda \eta(\theta, \varphi) \}. \quad (4)$$

Учитывая, что для симметричных направлений типа [001]  $\xi(0, 0) = \eta(0, 0) = 0$ , для [101]  $\xi(\pi/4, 0) = 0.25$ ,  $\eta(\pi/4, 0) = 0$ , для [111]  $\xi(\theta_{111}, \pi/4) = 1/3$ ,  $\eta(\theta_{111}, \pi/4) = 1.27$ , мы без труда находим соответствующие коэффициенты (табл. 1). Например, для продольных мод коэффициенты  $a_1^\lambda$  и  $a_2^\lambda$  могут быть представлены в виде

$$a_1^L = 4 [A_{[101]}^L - A_{[001]}^L] / A_{[001]}^L,$$

$$a_2^L = 9 [3A_{[111]}^L - 4A_{[101]}^L + A_{[001]}^L] / A_{[001]}^L. \quad (5)$$

Аналогично находятся остальные коэффициенты. Их значения приведены в табл. 1. Окончательное выражение для спектра фононов можно представить в виде

$$\omega_q^\lambda = \omega_{0m}^\lambda(\theta, \varphi) x \{ 1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi) \},$$

$$\omega_{0m}^\lambda(\theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi) q_{max}(\theta, \varphi),$$

$$f^\lambda(x, \theta, \varphi) = f_{[001]}^\lambda(x) + f_1^\lambda(x) \xi(\theta, \varphi) + f_2^\lambda(x) \eta(\theta, \varphi),$$

$$f_{[001]}^\lambda(x) = A_{[001]}^\lambda x^2 - B_{[001]}^\lambda x^4 + C_{[001]}^\lambda x^6 - \dots,$$

$$f_1^\lambda(x) = 4x^2 [A_{[101]}^\lambda - A_{[001]}^\lambda - (B_{[101]}^\lambda - B_{[001]}^\lambda)x^2 + (C_{[101]}^\lambda - C_{[001]}^\lambda)x^4 - \dots],$$

$$f_2^\lambda(x) = 9x^2 [(3A_{[111]}^\lambda - 4A_{[101]}^\lambda + A_{[001]}^\lambda)$$

$$- (3B_{[111]}^\lambda - 4B_{[101]}^\lambda + B_{[001]}^\lambda)x^2$$

$$+ (3C_{[111]}^\lambda - 4C_{[101]}^\lambda + C_{[001]}^\lambda)x^4 - \dots]. \quad (6)$$

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 ( $x \sim 1$ ). Мы провели сравнение спектров, рассчитанных согласно формулам (1)–(6) для Si, с экспериментальными данными [13] для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба ( $\varphi = 0$ ) и в диагональной плоскости ( $\varphi = \pi/4$ ). Как показал проведенный анализ, при  $x \leq 0.2$  спектр хорошо описывается моделью анизотропного континуума. При значениях  $x \approx 0.5$  наше приближение описывает все особенности спектра колебательных мод с погрешностью, не превышающей 5%. Однако по мере приближения к границе зоны Бриллюэна погрешность аппроксимации возрастает. На границе зоны Бриллюэна в направлениях, отличных от симметричных, погрешность достигает 20%. В дальнейшем, чтобы не усложнять задачу расчета теплопроводности, мы ограничимся линейной по кубическим гармоникам аппроксимацией спектра согласно выражениям (1)–(6).

Важной характеристикой, определяющей влияние дисперсии на фокусировку фононов, является групповая скорость. В системе координат с осями, направленными по ребрам куба, она может быть представлена в виде [20]

$$\mathbf{V}_g^\lambda(x, \theta, \varphi) = d\omega_q^\lambda/d\mathbf{q} = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(x, \theta, \varphi),$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(x, \theta, \varphi) = V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \mathbf{n} + S_\theta^\lambda \mathbf{e}_\theta + S_\varphi^\lambda \mathbf{e}_\varphi, \quad (7)$$

$$V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) = 1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi) - x \frac{\partial}{\partial x} f^\lambda(x, \theta, \varphi). \quad (8)$$

Векторы  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{e}_\theta$  и  $\mathbf{e}_\varphi$  образуют тройку взаимно ортогональных единичных векторов (векторы  $\mathbf{e}_\theta$  и  $\mathbf{e}_\varphi$  определены в [11]). Безразмерные компоненты групповой скорости  $S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi)$  и  $S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi)$  определяются выражениями

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

$$S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \left\{ \left[ \frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \xi} (1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)) - f_1^\lambda(x) \right] \frac{\partial \xi}{\partial \varphi} + \left[ \frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \eta} (1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)) - f_2^\lambda(x) \right] \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} \right\}. \quad (9)$$

Функции  $\frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \xi}$ ,  $\frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \eta}$ ,  $\frac{\partial \xi}{\partial \theta}$ ,  $\frac{\partial \xi}{\partial \varphi}$ ,  $\frac{\partial \eta}{\partial \theta}$  и  $\frac{\partial \eta}{\partial \varphi}$  определены в работе [11]. Компоненты групповой скорости фононов в декартовой системе координат имеют вид

$$V_{gx}^\lambda(x, \theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{ V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \theta \cos \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \cos \varphi - S_\varphi^\lambda \sin \varphi \},$$

$$V_{gy}^\lambda(x, \theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{ V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \theta \sin \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \sin \varphi + S_\varphi^\lambda \cos \varphi \},$$

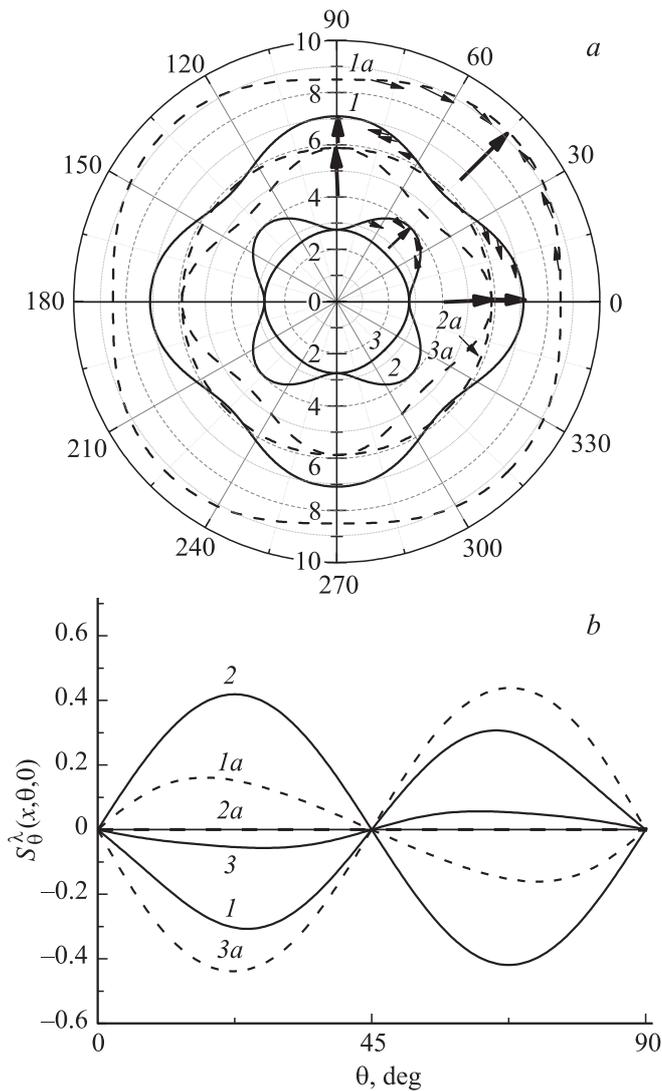
$$V_{gz}^\lambda(x, \theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{ V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \cos \theta - S_\theta^\lambda \sin \theta \}. \quad (10)$$

Рассмотрим изменение угловых зависимостей фазовых скоростей фононов в Si

$$S^\lambda(x, \theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{ 1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi) \}. \quad (11)$$

Как видно из рисунка 2, а, анизотропия фазовых скоростей фононов качественно изменяется при переходе от длинноволновых  $x \ll 1$  к коротковолновым ( $x = 0.9$ ) фононам. Для волновых векторов в плоскости грани куба при  $x = 0.01$  фазовая скорость продольных фононов достигает минимума в направлениях типа [001], а максимума — в направлениях типа [101]. Однако при переходе к значениям  $x = 0.9$  положения максимумов и минимумов меняются местами: максимум  $S^L(x, \theta, 0)$  переходит в направления типа [001], а минимум — в направления типа [101] (рис. 2, а, кривые 1, 1а). Качественно изменяется и анизотропия фазовых скоростей поперечных фононов обеих колебательных ветвей (рис. 2, а, кривые 2, 2а, 3, 3а). Так, например, для волновых векторов в плоскости грани куба при  $x = 0.01$  быстрая мода  $t_1$  изотропна, однако при  $x = 0.9$  она становится анизотропной с максимальной скоростью вдоль направлений [101] и минимальной в направлениях типа [001]. В противоположность этому медленная мода  $t_2$ , являющаяся анизотропной в длинноволновом пределе  $x \ll 1$ , становится почти изотропной при  $x = 0.9$ . Отметим, что если для продольных фононов изменение анизотропии спектра проявляется в пересечении ветвей, соответствующих различным симметричным направлениям, то на поперечные фононы дисперсия оказывает более сильное влияние. Для всех симметричных направлений у них появляются плоские участки спектра в коротковолновой области  $0.5 < x < 1$ , где групповая скорость имеет аномально малые величины (рис. 1). Как мы увидим далее, качественное изменение анизотропии спектра тепловых фононов приводит к изменению направлений, в которых фокусируются фононы различных колебательных ветвей.

Для того чтобы исследовать влияние дисперсии на изменение фокусировки фононов в кремнии, построим угловые зависимости компоненты групповой скорости  $S_\theta^\lambda(x, \theta, 0)$ , которая определяет тангенс угла между направлениями групповой скорости и волновым вектором для значений  $x = 0.01$  и  $0.9$  (рис. 2, б). Направления вектора  $\mathbf{S}_\theta^\lambda$  отмечены тонкими стрелками на рис. 2, а. Рассмотрим случай волновых векторов в плоскости грани куба. Для продольных фононов при  $x = 0.01$  в интервале углов  $0 \leq \theta \leq \pi/4$  величина  $S_\theta^L(x, \theta, 0) > 0$ , они фокусируются в направлениях [101], тогда как при  $x = 0.9$  величина  $S_\theta^L(x, \theta, 0) > 0$ , и направление фокусировки переходит в [001] (рис. 2, б, кривые 1 и 1а). Поскольку при этом  $|S_\theta^L(x = 0.9)| > |S_\theta^L(x = 0.01)|$ , то  $x = 0.9$  фокусировка продольных фононов в направлениях типа [001] значительно усиливается: увеличивается угол между векторами  $\mathbf{V}_g^\lambda$  и  $\mathbf{q}$ . При изменении приведенного волнового вектора от  $x = 0.01$  до  $0.9$  в интервале углов  $0 \leq \theta \leq \pi/4$  величина  $S_\theta^L(x, \theta, 0)$ , и направление



**Рис. 2.** Угловые зависимости фазовой скорости  $S^\lambda(x, \theta, 0)$  ( $10^5$  см/с) (a) и безразмерной компоненты групповой скорости  $S_\theta^\lambda(x, \theta, 0)$  (b) для волновых векторов в плоскости грани куба при значениях приведенного волнового вектора  $x = 0.01$  ( $1a-3a$ ) и  $0.9$  ( $1-3$ ).  $1, 1a$  — для продольных фононов;  $2, 2a$  — для быстрых поперечных;  $3, 3a$  — для медленных поперечных фононов. Направления фокусировки отмечены жирными радиальными стрелками.

фокусировки для моды  $t_2$  остается в  $[001]$ . Однако при  $x = 0.9$  мода  $t_2$  становится почти изотропной, поэтому  $|S_\theta^{t_2}(x = 0.9)| \ll |S_\theta^{t_2}(x = 0.001)|$ , и угол между векторами  $\mathbf{V}_g^\lambda$  и  $\mathbf{q}$ , а также эффект фокусировки для нее существенно уменьшается. Быстрая поперечная мода в длинноволновой области является почти изотропной, эффект фокусировки для нее слабо выражен. Однако при  $x = 0.9$  ее анизотропия значительно возрастает (рис. 2, a, кривая 2a). При этом в интервале углов  $0 \leq \theta \leq \pi/4$  величина  $S_\theta^{t_1} > 0$ , и мода  $t_1$  фокусируется в направлениях типа  $[101]$  (рис. 2, b, кривые 2 и 2a). Очевидно, что качественное изменение анизотропии

спектра тепловых фононов и направлений фокусировки с увеличением волнового вектора должно приводить к изменению релаксационных характеристик фононной системы и фононного транспорта в кубических кристаллах с повышением температуры. Далее на примере теплопроводности кремния мы покажем, что эффекты, обусловленные дисперсией, необходимо учитывать при анализе фононного транспорта.

### 3. Влияние дисперсии на анизотропию и температурную зависимость теплопроводности кремния

Исходным является выражение для теплопроводности в приближении времени релаксации [8–9]. В системе координат с осями, направленными по ребрам куба, в режиме граничного рассеяния при учете дисперсии тепловых фононов его можно представить в виде

$$\kappa(T) = \frac{k_B}{4(2\pi)^3} \sum_\lambda \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{(z_{0m}^\lambda(\theta, \varphi))^3}{S_0^\lambda(\theta, \varphi)} \times \int_0^1 \frac{(\tilde{V}_{g3}^\lambda(y, \theta, \varphi))^2 z_\lambda^2 y^2 dy}{v_{\text{phB}}^\lambda(z_\lambda) (\text{sh}(z_\lambda/2))^2},$$

$$z_\lambda(y, \theta, \varphi) = \frac{\hbar \omega_q^\lambda(y, \theta, \varphi)}{k_B T} = z_{0m}^\lambda(\theta, \varphi) y (1 - f^\lambda(y, \theta, \varphi)),$$

$$z_{0m}^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{\hbar \omega_{0m}^\lambda(\theta, \varphi)}{k_B T} = \frac{\hbar S_0^\lambda(\theta, \varphi) q_{\text{max}}(\theta, \varphi)}{k_B T}, \quad y = \frac{q}{q_{\text{max}}}. \tag{12}$$

Здесь  $\tilde{V}_{g3}^\lambda$  — проекция вектора групповой скорости  $\tilde{\mathbf{V}}$  на направление градиента температуры,  $T$  — температура,  $v_{\text{phB}}^\lambda(q)$  — скорость релаксации фононов на границах. Здесь мы рассмотрим случай образцов длины  $L$  с квадратным сечением  $D \times D$ . Скорости релаксации фононов для диффузного рассеяния на границах, рассчитанные в работе [11], являются кусочно-гладкими функциями. Для различных интервалов углов они определяются соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами образца. Отметим, что скорости релаксации  $v_{\text{phB}}^\lambda(q)$  зависят не только от ориентации градиента температуры, но и от ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла [11]. Компоненты групповой скорости фононов определены выражениями (7)–(10). При анализе теплопроводности в режиме граничного рассеяния для кристаллов кремния спектр и групповые скорости фононов определим в системе координат с осями, направленными по ребрам куба. Предполагается, что направления градиента температур и продольной оси образца совпадают. Рассмотрим два наиболее актуальных случая: 1) градиент температур (ось образца) вращается в плоскости грани куба  $XZ$  ( $\nabla_r T = |\nabla_r T| \{\sin \Phi, 0, \cos \Phi\}$ );

2) градиент температур вращается в диагональной плоскости ( $\nabla_r T = |\nabla_r T| \{ \sin \Phi / \sqrt{2}, \sin \Phi / \sqrt{2}, \cos \Phi \}$ ). Для этих вариантов зависимости от угла  $\Phi$  проекций групповой скорости фононов, параллельных и перпендикулярных градиенту температуры и боковым граням образца, представлены в [11] формулами (33)–(37). При фиксированной температуре они определяют зависимости теплопроводности  $\kappa(T, \Phi)$  от угла  $\Phi$ .

#### 4. Сравнение исходных предположений теории с условиями эксперимента: диффузное рассеяние фононов и дефектный поверхностный слой

В настоящем разделе показано, что возможной причиной расхождения рассчитанных  $\kappa_{\text{theor}}(T_0)$  и измеренных  $\kappa_{\text{exp}}(T_0)$  значений теплопроводности в [1] при  $T_0 = 3$  К является пренебрежение дефектным поверхностным слоем при определении экспериментальных величин теплопроводности. Заметим, что в случае граничного рассеяния фактические размеры образцов, в которых имеется тепловой поток, могут заметно отличаться от их геометрических размеров. Важным обстоятельством, на которое ранее указывалось в литературе (см. [23,24]), является шлифовка поверхности образцов с использованием абразива для обеспечения диффузного рассеяния фононов поверхностью. При такой обработке непосредственно под поверхностью образцов формируется дефектный слой материала [25], толщина которого может достигать от одного до нескольких размеров частиц абразива. В работе [11] параметр эффективной ширины образца  $D_{\text{eff}} = D - \Delta$ , где  $\Delta$  — толщины дефектного слоя, использовался в качестве подгоночного параметра теории, давалась грубая оценка этого параметра  $D_{\text{eff}}^{(1)} = \{D - \Delta^1\} = 0.278$  см из равенства рассчитанных и экспериментальных значений теплопроводности  $\kappa_{\text{theor}}(T_0, D_{\text{eff}}^{(1)}) = \kappa_{\text{exp}}(T_0)$  при  $T_0 = 3$  К (рис. 3, пересечение кривых 1 и 2). В результате для толщины дефектного слоя находим  $\Delta^{(1)} = 0.0075$  см, что соответствует диаметру частиц абразива  $((7-8) \cdot 10^{-3}$  см), использованного в [1]. Однако при такой оценке [11] не учитывается, что дефектный слой не принимает участия в теплопроводности (его теплопроводность мала, и ею можно пренебречь [24]). Дело в том, что при измерении теплопроводности методом продольного теплового потока ее величина определяется делением тепловой мощности, выделяемой в нагревателе, на площадь поперечного сечения образца и градиент температуры. В работе [1] дефектный слой не учитывался: сечение образца бралось равным  $D^2$ , а не  $(D_{\text{eff}})^2$ . Поскольку дефектный слой не проводит тепла, величины теплопроводности, измеренной в [1], оказались заниженными относительно  $(D/D_{\text{eff}})^2$ , поэтому истинное экспериментальное значе-

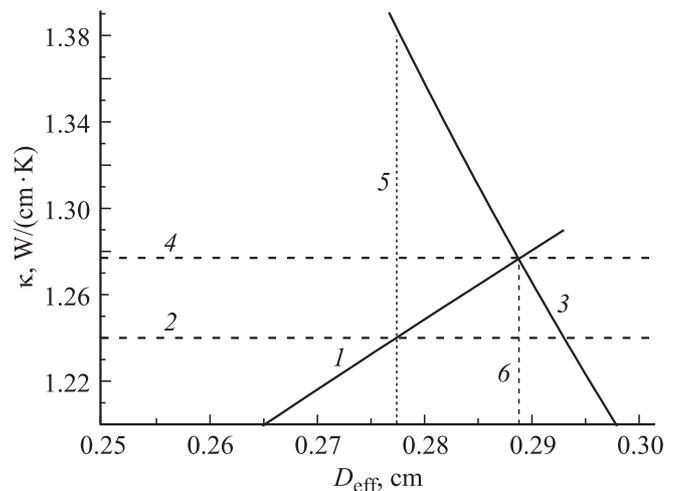


Рис. 3. Зависимости теплопроводностей  $\kappa_{\text{theor}}(T_0, D_{\text{eff}})$  (кривая 1) и  $\kappa_{\text{exp}}^{(2)}(T_0, D_{\text{eff}})$  (кривая 3) для образца с квадратным сечением и осью вдоль [001] от эффективной ширины образца  $D_{\text{eff}}$ . Штриховые линии: 2 — экспериментальное значение [1] при  $T_0 = 3$  К, 4 — истинная теплопроводность  $\kappa_{\text{exp}}^{(2)}(T_0, D_{\text{eff}}^{(2)})$ , 5, 6 — значения эффективных параметров  $D_{\text{eff}}^{(1)} = 0.278$  см и  $D_{\text{eff}}^{(2)} = 0.289$  см.

ние  $\kappa_{\text{exp}}^{(2)}(T_0, D_{\text{eff}})$  определяется выражением

$$\kappa_{\text{exp}}^{(2)}(T_0, D_{\text{eff}}) = \kappa_{\text{exp}}(T_0) (D/D_{\text{eff}})^2. \quad (13)$$

При использовании грубой оценки [11]  $D_{\text{eff}}^{(1)} = 0.278$  см расхождение теории и эксперимента только увеличивается (рис. 3, пересечение кривых 3 и 5). На самом деле эффективную ширину следует находить из условия равенства теплопроводности, рассчитанной как функции  $D_{\text{eff}}$ , экспериментальному значению  $\kappa_{\text{exp}}^{(2)}(T_0, D_{\text{eff}})$  с поправкой на эффективную ширину (рис. 3, пересечение кривых 1 и 3)

$$\kappa_{\text{theor}}(T_0, D_{\text{eff}}) = \kappa_{\text{exp}}^{(2)}(T_0, D_{\text{eff}}). \quad (14)$$

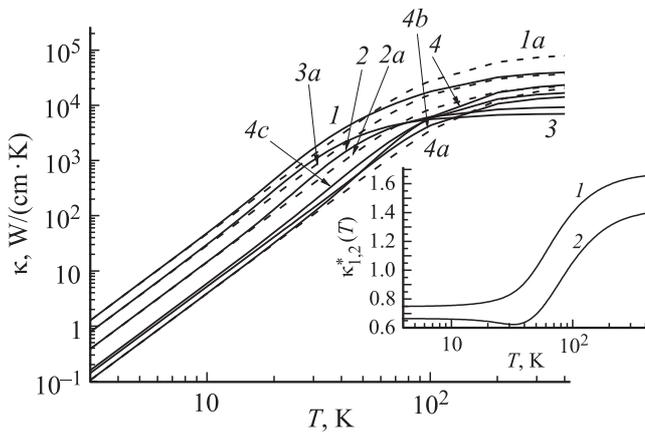
Из уравнения (14) для направления [001] находим эффективную ширину  $D_{\text{eff}}^{(2)} = 0.289$  см и истинную теплопроводность  $\kappa_{\text{theor}}(T_0, D_{\text{eff}}^{(2)}) = 1.277$  Вт · см<sup>-1</sup> · К<sup>-1</sup>, которая оказывается больше исходного значения  $\kappa_{\text{exp}}(T_0) = 1.24$  Вт · см<sup>-1</sup> · К<sup>-1</sup> на 3%. В этом случае ширина дефектного слоя  $\Delta^{(2)} = \{D - D_{\text{eff}}^{(2)}\}/2 = 0.002$  см оказывается меньше грубой оценки  $\Delta^{(1)}$  примерно в 3 раза. Результаты расчета параметров эффективной ширины и ширины дефектного слоя в образцах Si с квадратным сечением, исследованных в [1], приведены в табл. 2. Как видно из этой таблицы, величины  $\Delta^{(2)}$  составляют от 30 до 70% диаметра частиц абразива. Итак, использование представления о дефектном слое и эффективной ширине образца позволяет согласовать результаты расчета теплопроводности с исправленными значениями экспериментальных данных [1].

**Таблица 2.** Результаты расчета эффективной ширины  $D_{\text{эф}}$  и ширины дефектного слоя  $\Delta$  для образцов кремния с геометрическими параметрами  $L = 2.9 \text{ cm}$  и  $D = 0.293 \text{ cm}$ , исследованных в [1]

Ось образца	Грани образца	$D_{\text{эф}}^{(1)}, \text{ cm}$	$\Delta^{(1)}, \text{ cm}$	$D_{\text{эф}}^{(2)}, \text{ cm}$	$\Delta^{(2)}, \text{ cm}$	$\kappa_{\text{эксп}}, \text{ W/cm} \cdot \text{ K}$	$\kappa_{\text{эксп}}^{(2)}, \text{ W/cm} \cdot \text{ K}$	$D_{\text{эф}}^{(2)}/L$
[001]	{100}	0.278	0.0075	0.289	0.0021	1.24	1.277	0.0996
[101]	{100}	0.27	0.0116	0.286	0.0036	0.87	0.914	0.0986
[111]	{110}	0.274	0.0095	0.287	0.0030	0.81	0.844	0.099
[001]	{112}							
[001]	{110}	0.257	0.0182	0.2829	0.0051	1.16	1.245	0.0975

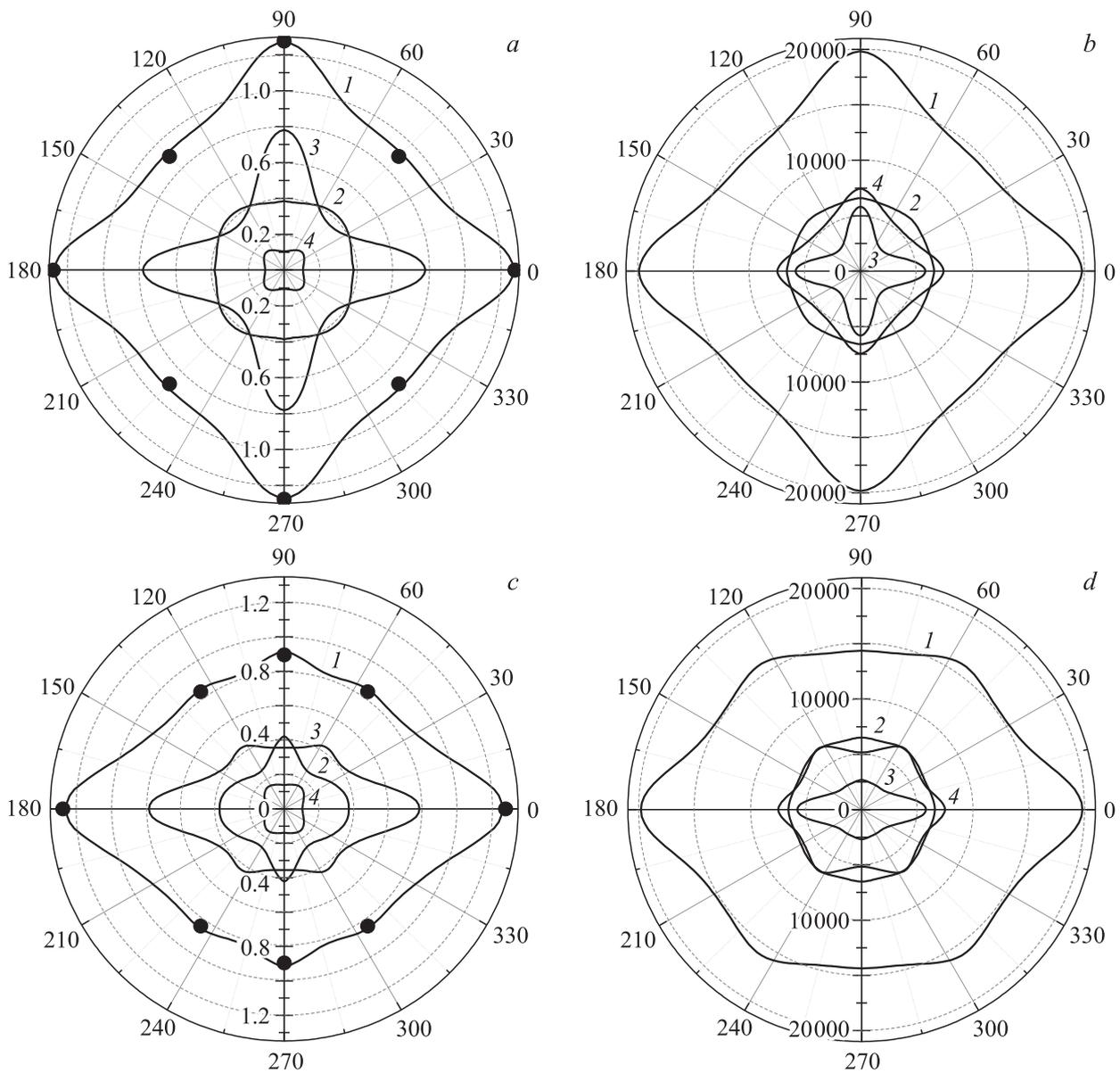
### 5. Результаты численного анализа

Рассмотрим влияние дисперсии тепловых фононов на зависимость теплопроводности  $\kappa(T)$  кристаллов Si от температуры в режиме граничного рассеяния. Как видно из рис. 4, для направления [001] при температурах ниже 10 К кривые, рассчитанные с учетом дисперсии (сплошные кривые) и в модели анизотропного континуума (штриховые кривые), практически совпадают. В этой области температур доминирующий вклад в теплопроводность вносят поперечные фононы. Вклад продольных фононов  $\kappa^L(T)$  мал, он составляет приблизительно 10% полной теплопроводности. Отметим, что учет дисперсии приводит к возникновению двух факторов, влияющих противоположным образом на изменение теплопроводности с повышением температуры:



**Рис. 4.** Температурные зависимости  $\kappa(T)$  образцов с квадратным сечением, исследованных в [1], ( $L = 2.9 \text{ cm}$ ,  $D_{\text{эф}}^{(2)} = 0.289 \text{ cm}$ ) в режиме граничного рассеяния (кривые 1, 1a), а также вклады быстрых поперечных (2, 2a), медленных поперечных (3, 3a) и продольных (4, 4a) фононов для образцов с осью вдоль [001] и вклады продольных фононов для образцов с осями в направлениях [101] (4b) и [111] (4c). Сплошные линии (1–4, 4b, 4c) — расчет с учетом дисперсии фононов, штриховые (1a–4a) — в модели анизотропного континуума. На вставке приведены зависимости отношений  $\kappa_1^*(T) = \kappa_{[001]}^L / \kappa_{[101]}^L(T)$  (1) и  $\kappa_2^*(T) = \kappa_{[001]}^L / \kappa_{[111]}^L(T)$  (2) от температуры.

1) к росту  $\kappa(T)$  за счет увеличения плотности состояний поперечных фононов (пики плотности состояний соответствуют плоским участкам спектра поперечных фононов); 2) к замедлению роста  $\kappa(T)$  за счет аномального уменьшения групповой скорости поперечных фононов при выходе на плоские участки спектра (рис. 1). Как видно из рис. 4, дисперсия начинает заметно влиять на теплопроводность уже при  $T > 20 \text{ K}$ . Этот результат согласуется с выводом работы [26] о том, что влияние дисперсии на фокусировку наблюдается на частотах выше 0.4 THz. С увеличением температуры значения полной теплопроводности, рассчитанные с учетом дисперсии фононов (кривая 1), начинают превосходить значения, рассчитанные в модели анизотропного континуума (кривая 1a): при температуре 32 К их максимальное отношение составляет 1.32 (в этой области преобладает первый фактор). При дальнейшем увеличении температуры это отношение уменьшается, причем при температурах, больших 54 К оно становится меньшим единицы. Такое поведение обусловлено уменьшением групповой скорости медленных поперечных фононов в области плоского участка спектра  $q_{\text{max}}/2 < q < q_{\text{max}}$  (рис. 1) и соответственно уменьшением их вклада в теплопроводность (преобладает второй фактор). Как видно из рис. 4, вклад медленной поперечной моды  $\kappa^{t2}(T)$  (кривая 3), доминирующий при низких температурах и превосходящий в 2 раза вклад быстрой моды  $\kappa^{t1}(T)$  (кривая 2). При дальнейшем увеличении температуры преобладает второй фактор: сильная дисперсия коротковолновых поперечных мод (уменьшение их групповых скоростей) приводит к значительному замедлению роста  $\kappa^{t1}(T)$  и  $\kappa^{t2}(T)$ . Как видно из рис. 1, дисперсия оказывает существенно меньшее влияние на продольные моды: их групповые скорости уменьшаются незначительно, и вклад  $\kappa^L(T)$  при  $T > 70 \text{ K}$  возрастает значительно быстрее, чем вклады поперечных мод (рис. 4). Поэтому при  $T > 96 \text{ K}$  вклад  $\kappa^L(T)$  становится больше вклада  $\kappa^{t2}(T)$ , а при  $T > 101 \text{ K}$  он становится больше вклада быстрой поперечной моды и в 1.1 раза превосходит вклад  $\kappa^{t2}(T)$ . В противоположность этому расчет теплопроводности для модели анизотропного континуума (штриховые кривые) дает качественно от-



**Рис. 5.** Угловые зависимости полной теплопроводности (в единицах  $\text{W}/\text{cm} \cdot \text{K}$ ) (кривые 1) и вкладов каждой из ветвей фононного спектра при температурах 3 (*a, c*) и 110 К (*b, d*) для образцов с квадратным сечением ( $L = 2.9 \text{ cm}$  и  $D_{\text{eff}}^{(2)} = 0.289 \text{ cm}$ ) (кривые 2–4). 2 — для быстрой поперечной моды, 3 — для медленной поперечной моды, 4 — для продольной моды; *a, b* — ось образца (и градиент температуры) вращается в плоскости грани куба, *c, d* — ось образца вращается в диагональной плоскости. Символы — экспериментальные значения [1].

личный результат. Вклады  $\kappa^{t2}(T)$  и  $\kappa^{t1}(T)$  (кривые 3*a* и 2*a*) при 110 К остаются больше вклада продольных фононов в  $\kappa(T)$  (кривая 4*a*) в 4 и 2.3 раза соответственно. Таким образом, вывод о доминирующей роли поперечных фононов в теплопроводности кристаллов Si в интервале температур от 4 до 200 [15,16], сделанный ранее без учета дисперсии тепловых фононов, оказывается некорректным. Хотя этот результат получен для режима граничного рассеяния, однако очевидно, что и в условиях дефектного и ангармонических механизмов рассеяния аномально низкие значения групповой скорости поперечных фононов при учете дисперсии

приведут к существенному уменьшению их вклада в теплопроводность при высоких температурах.

Достаточно любопытно выглядит изменение угловых зависимостей теплопроводности и вкладов в теплопроводность от различных ветвей фононного спектра с увеличением температуры (рис. 5). Такое поведение связано с изменением анизотропии спектра фононов при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам и обусловлено влиянием дисперсии на фокусировку фононов различных ветвей спектра. Как видно из рис. 5, *a* и *c*, при температуре 3 К основной вклад в теплопроводность вносят медленные попереч-

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

$\tilde{\kappa}_{[J]}^{\lambda}(T)$	[001]			[101]			[111]		
	$T = 3$ К	$T = 50$ К	$T = 110$ К	$T = 3$ К	$T = 50$ К	$T = 110$ К	$T = 3$ К	$T = 50$ К	$T = 110$ К
$\tilde{\kappa}_{[J]}^{t_1}$	0.31	0.38	0.33	0.46	0.54	0.45	0.30	0.51	0.42
$\tilde{\kappa}_{[J]}^{t_2}$	0.61	0.50	0.29	0.39	0.31	0.19	0.51	0.28	0.16
$\tilde{\kappa}_{[J]}^L$	0.08	0.12	0.38	0.15	0.15	0.36	0.19	0.21	0.42

ные фононы. Они фокусируются в направлении [001], и их вклад в этом направлении максимален (он достигает 61% полной теплопроводности). В направлении [101] вклад медленной поперечной моды минимален (направление дефокусировки) и составляет 39%, тогда как вклад быстрой поперечной моды максимален и составляет 46% (табл. 3). Вклад продольных фононов для всех направлений значительно меньше. Его максимальное значение (19%) достигается в направлении фокусировки [111], а минимальное (8%) — в направлении дефокусировки [001] (табл. 3). Как видно из табл. 3, при  $T = 50$  К качественных изменений в соотношении теплопроводностей различных ветвей фононного спектра не происходит. Однако при температурах выше 110 К в теплопроводности начинают преобладать продольные фононы. Они фокусируются уже в направлении [001], и вклад  $\kappa^L(T)$  в этом направлении превышает вклады медленной и быстрой поперечных мод в 1.3 и 1.2 раза соответственно (рис. 5, *b*). Для направления [111] при  $T = 110$  К вклад  $\kappa^L(T)$  сравнивается с вкладом быстрой поперечной моды и почти в 3 раза превосходит вклад медленной моды (рис. 5, *d*). Однако в направлении [101], в котором фокусируются фононы быстрой поперечной моды  $t_1$  при  $T = 110$  К, вклад продольных фононов  $\kappa^L(T)$  оказывается меньше вклада  $\kappa^{t_1}(T)$  в 1.27 раза, но больше вклада  $\kappa^{t_2}(T)$  в 1.9 раза (рис. 5, *d*).

Из табл. 3 следует, что наиболее резко возрастает относительный вклад продольных фононов в теплопроводность для направления [001]: при повышении температуры от 3 до 110 К величина  $\tilde{\kappa}_{[001]}^L = \kappa_{[001]}^L(T)/\kappa_{[001]}(T)$  возрастает в 4.7 раза, тогда как для направления [111] он увеличивается только в 2.2 раза. В связи с этим мы проанализировали температурные зависимости вклада продольных фононов в теплопроводность для всех симметричных направлений и обнаружили достаточно любопытный эффект: изменение направления фокусировки продольных фононов приводит к изменению температурной зависимости вклада продольных фононов в теплопроводность в кристаллах Si. Как уже отмечалось в разделе 2, при  $x \ll 1$  продольные фононы фокусируются в направлениях типа [111], а при  $x > 0.5$  — уже в направлении [001]. Поэтому с повышением температуры от 3 до 110 К меняется не только анизотропия вклада продольных фононов в  $\kappa(T)$  (ее максимум, как видно из рис. 5, переходит из направления [111]

в [001]), но и температурная зависимость теплопроводности для направления [001]. Для иллюстрации этого эффекта кроме температурных зависимостей  $\kappa^L(T)$  для симметричных направлений (кривые 4, 4*a*, 4*b*) мы привели зависимости отношений вкладов продольных фононов в теплопроводность  $\kappa_1^*(T) = \kappa_{[001]}^L(T)/\kappa_{[101]}^L(T)$  и  $\kappa_2^*(T) = \kappa_{[001]}^L(T)/\kappa_{[111]}^L(T)$  от температуры на вставке к рис. 4. Как видно из рис. 4, зависимости  $\kappa^L(T)$  для симметричных направлений остаются одинаковыми при  $T < 30$  К, поскольку основной вклад в теплопроводность вносят фононы с  $x \leq 0.5$ : кривые 1 и 2 на вставке в этом интервале практически не зависят от температуры. Однако при дальнейшем увеличении температуры выше 30 К в  $\kappa^L(T)$  возрастает доля коротковолновых фононов, которые фокусируются в направлении [001]. Поэтому вклад продольных фононов  $\kappa_{[001]}^L(T)$  начинает расти значительно быстрее с температурой, чем для направлений [101] и [111]. При  $T > 90$  К он становится больше, чем для направления [111]. Как видно из вставки к рис. 4, степень температурной зависимости теплопроводности в интервале  $30 < T < 200$  К для направления [001] оказывается выше, чем для направлений [101] и [111]. Таким образом, изменение анизотропии спектра фононов при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам в кристаллах Si приводит к изменению направлений, в которых фокусируются фононы различных ветвей спектра, и обуславливает изменение не только анизотропии, но и температурных зависимостей теплопроводности в режиме граничного рассеяния.

## 6. Заключение

Исследовано влияние дисперсии на фокусировку тепловых фононов и изменение анизотропии теплопроводности кристаллов кремния с температурой в режиме граничного рассеяния. Проведено сравнение исходных теоретических предположений [1] при расчете теплопроводности с условиями ее экспериментального определения при диффузном рассеянии фононов на границах образца. Показано, что экспериментальные данные для теплопроводности [1] должны быть скорректированы в соответствии с представлениями о дефектном слое на поверхности образца, не принимающем участия в теплопроводности, и об эффективной ширине образца,

развитыми в настоящей работе. Проанализировано изменение анизотропии теплопроводности кристаллов кремния с температурой в режиме граничного рассеяния. Рассмотрены два наиболее актуальных случая: 1) градиент температуры (ось образца) вращается в плоскости грани куба  $XZ$ ; 2) градиент температуры вращается в диагональной плоскости. Анализ температурной зависимости теплопроводности в режиме граничного рассеяния показал, что основное влияние на нее оказывает дисперсия поперечных фононов: наличие протяженных плоских участков спектра поперечных коротковолновых фононов приводит к аномально низким значениям групповой скорости и соответственно к значительному уменьшению вклада поперечных фононов в теплопроводность с ростом температуры по сравнению с расчетами в модели анизотропного континуума. Полученные в настоящей работе результаты могут быть использованы при исследовании теплопроводящих свойств кремниевых нанопроводов.

Основные результаты работы могут быть сформулированы следующим образом.

1. Экспериментальный спектр фононов для кристаллов Si экстраполирован на всю зону Бриллюэна в виде, позволяющем исследовать влияние дисперсии на фокусировку и релаксационные характеристики фононной системы.

2. Показано, что изменение анизотропии фононного спектра в кристаллах Si при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам приводит к изменению направлений, в которых фокусируются фононы различных поляризаций.

3. Изменение направлений фокусировки при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам приводит к изменению анизотропии вкладов в теплопроводность от фононов различных поляризаций и соответственно к изменению анизотропии полной теплопроводности с повышением температуры.

4. Наличие протяженных плоских участков спектра поперечных коротковолновых фононов приводит к аномально низким значениям их групповой скорости и существенному уменьшению их вклада в теплопроводность  $\kappa(T)$  с повышением температуры. При этом вклад продольных фононов в  $\kappa(T)$  возрастает и при  $T > 110$  К становится доминирующим. Поэтому вывод о доминирующей роли поперечных фононов в теплопроводности кристаллов Si, полученный ранее без учета дисперсии, является некорректным.

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

Итак, проведенный нами анализ убедительно показал, что эффекты, обусловленные дисперсией, необходимо

учитывать при анализе фононного транспорта в кубических кристаллах.

## Список литературы

- [1] A.K. McCurdy, H.J. Maris, C. Erlbaum. Phys. Rev. B **2**, 4077 (1970).
- [2] B. Taylor, H.J. Maris, C. Erlbaum. Phys. Rev. Lett. **23**, 416 (1969).
- [3] A.K. McCurdy. Phys. Rev. B **26**, 6971 (1982).
- [4] H.J. Maris. J. Acoust. Soc. Am. **50**, 812 (1971).
- [5] M. Lax, V. Narayanamurti. Phys. Rev. B **22**, 4876 (1980).
- [6] P. Wolfe. Imaging phonons acoustic wave propagation in solids. Cambridge University Press, N.Y. (1998), 411 p.
- [7] H.B.G. Casimir. Physica **5**, 495 (1938).
- [8] В.Л. Гуревич. Кинетика фононных систем. Наука, М. (1980), 400 с.
- [9] Б.М. Могилевский, А.Ф. Чудновский. Теплопроводность полупроводников. Наука, М. (1972). 536 с.
- [10] А.П. Жернов, А.В. Инюшкин. Изотопические эффекты в твердых телах. РИЦ „Курчатовский институт“, М. (2001). 216 с.
- [11] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С.М. Бахарев, А.В. Инюшкин. ФТТ **55**, 1, 24 (2013).
- [12] H. Bilz, W. Kress. Phonon dispersion relations in insulators. Springer Ser. in Solid-State Sci. 10, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg-N.Y. (1979). 241 p.
- [13] G. Nilson, G. Nelin. Phys. Rev. B **6**, 3777 (1972).
- [14] G. Holland. Phys. Rev. **132**, 2461 (1963).
- [15] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ЖЭТФ **120**, 3(9), 649 (2001); ЖЭТФ **121**, 3(9), 558 (2002).
- [16] R.A.H. Hamilton, J.E. Parrot. Phys. Rev. **178**, 1284 (1969).
- [17] J. Zou, A. Balandin. J. Appl. Phys. **89**, 2932 (2001).
- [18] N. Mingo. Phys. Rev. B **68**, 113 308 (2003); N. Mingo, L. Yang, D. Li, A. Majumdar. NanoLett. **3**, 1713 (2003).
- [19] A.D. McConnell, K.E. Goodson. Ann. Rev. Heat Transfer **14**, 128 (2005).
- [20] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев. ФТТ **53**, 8, 1564 (2011).
- [21] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ФТТ **49**, 3, 422 (2007).
- [22] J.J. Hall. Phys. Rev. **161**, 756 (1967).
- [23] J.P. Harrison, J.P. Pendrys. Phys. Rev. B **7**, 3902 (1973).
- [24] M.P. Zaitlin, L.M. Scherr, A.C. Anderson. Phys. Rev. B **12**, 4487 (1975).
- [25] 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.
- [26] S. Tamura, J.A. Shields, J.P. Wolfe. Phys. Rev. B **44**, 3001 (1991).