

Ангармонические процессы рассеяния и релаксация медленных квазипоперечных фононов в кубических кристаллах

© И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, И.Ю. Арапова

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
Екатеринбург, Россия

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 30 июня 2008 г.)

Рассмотрена релаксация медленных квазипоперечных фононов в ангармонических процессах рассеяния в кубических кристаллах с положительной (Ge, Si и алмаз) и отрицательной (KCl и NaCl) анизотропией модулей упругости второго порядка. В модели анизотропного континуума проанализированы зависимости скоростей релаксации от направления волнового вектора фононов в процессах рассеяния с участием трех квазипоперечных фононов (механизмы релаксации ТТТ). Показано, что механизмы релаксации ТТТ обусловлены кубической анизотропией кристаллов, приводящей к взаимодействию неколлинеарных фононов. Доминирующий вклад в релаксацию фононов вносит рассеяние на большие углы. Для кристаллов с существенной анизотропией упругой энергии (Ge, Si, KCl и NaCl) суммарный вклад механизмов релаксации ТТТ превосходит вклад механизма Ландау–Румера в полную скорость релаксации либо в несколько раз, либо на один–два порядка величины в зависимости от направления. В значительной степени доминирующая роль механизмов релаксации ТТТ по сравнению с механизмом Ландау–Румера обусловлена упругими модулями второго порядка. Найдены полные скорости релаксации медленных квазипоперечных фононов. Показано, что при доминирующей роли ангармонических процессов рассеяния учет одного из механизмов релаксации (Ландау–Румера или механизмов релаксации медленной квазипоперечной моды на двух медленных или двух быстрых модах) недостаточен для описания анизотропии полных скоростей релаксации в кубических кристаллах.

Работа выполнена по плану РАН в рамках темы № 01.2.006.13395 при поддержке программы президиума РАН № 24, ведущей научной школы № НШ 3257.2008.2, а также Фонда содействия отечественной науке.

PACS: 62.20.D-, 62.80.+f, 63.20.-e, 63.20.K-, 63.20.D-

1. Введение

Определение доминирующих механизмов релаксации и расчет полных скоростей релаксации фононов различных поляризаций представляют большой интерес для изучения поглощения ультразвука и фононного транспорта в кубических кристаллах. Согласно сложившемуся в литературе мнению [1–5] основным механизмом релаксации поперечных фононов в нормальных трехфононных процессах рассеяния является механизм Ландау–Румера [6], в котором слияние поперечного фонона с продольным порождает продольный фонон ($T + L \rightarrow L$). Этот механизм релаксации считается основным для поперечных тепловых фононов при расчетах решеточной теплопроводности [7–9]. В длинноволновом приближении $\hbar\omega_q^\lambda \ll k_B T$ (T — температура, $\omega_{q\lambda}$ — частота фонона с волновым вектором q и поляризацией λ) он дает хорошо известную линейную зависимость [1–6] скорости релаксации поперечных фононов от волнового вектора вида $v_{\text{TLL}}^\lambda \sim qT^4$.

В настоящей работе мы ограничимся длинноволновым приближением и рассмотрим все ангармонические механизмы релаксации медленных квазипоперечных фононов, приводящих к линейной зависимости скорости релаксации от волнового вектора типа Ландау–Румера. Это позволит определить полную скорость релаксации медленных квазипоперечных фононов. Проведенный анализ показал, что такими процессами релаксации

кроме механизма Ландау–Румера являются процессы слияния двух поперечных фононов, принадлежащих к различным колебательным ветвям, с образованием поперечного фонона типа $T_1^\lambda + T_2^{\lambda_1} \rightarrow T_3^{\lambda_1}$: (λ и λ_1 — поляризации фононов, которые принимают два значения: t_1 — быстрая квазипоперечная мода и t_2 — медленная квазипоперечная мода). Эти процессы рассеяния (механизмы ТТТ) могут приводить к функциональным зависимостям скоростей релаксации длинноволновых поперечных фононов медленной моды t_2 такого же вида, как и для механизма Ландау–Румера: $v_{\text{TLL}}^{t_2} \approx qT^4$, и могут конкурировать с механизмом Ландау–Румера [6]. Оценки [1–4] показали, что для изотропных сред механизмы ТТТ неэффективны. Дело в том, что в изотропных средах поперечные моды вырождены, и в процессах $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$ могут участвовать только коллинеарные фононы [1–4]. Однако, как показал анализ [10], матричный элемент такого взаимодействия и соответственно скорости релаксации поперечных фононов обращаются в нуль. Использование приближения изотропной среды [3–10] для оценки вероятности различных процессов рассеяния не является адекватным для кристаллов германия, кремния, алмаза и других полупроводниковых соединений, имеющих кубическую симметрию с существенной анизотропией, как гармонической, так и ангармонической энергии. Будет показано, что ангармонические процессы релаксации с участием трех поперечных фононов в таких кристаллах, как Ge, Si, алмаз,

KCl и т.д., обусловлены исключительно кубической анизотропией.

Механизмы ТТТ в кубических кристаллах исследовались в работах [11–13]. Однако приближения, принятые в работах [11–13], не являются адекватными для кубических кристаллов. Во-первых, при расчете трехфононных процессов рассеяния не учитывалось влияние кубической анизотропии на поляризации фононов: колебательные моды считались чисто поперечными модами, как и в изотропных средах. Используемая при этом процедура усреднения по направлениям векторов поляризации в матричном элементе не является корректной для кубических кристаллов. Во-вторых, коэффициенты поглощения ультразвука рассчитывались только для симметричных направлений. Известно [1–5], что в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания, и только в симметричных направлениях, таких как [100], [110] и [111], распространяются чистые моды. Анализ спектра и поляризации колебательных ветвей, проведенный в [14], показал, что вклад продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым, и при усреднении по векторам поляризации в скоростях релаксации квазипоперечных фононов необходимо учитывать продольную компоненту этих мод. Поэтому принятые в [11–13] приближения приводят к большой погрешности при расчете скоростей релаксации поперечных фононов. В настоящей работе влияние кубической анизотропии на спектр и поляризацию фононов в модели анизотропного континуума учтено строго. Удобным приближением для решения таких задач является модель анизотропного континуума. В этой модели гармоническая энергия кубических кристаллов выражается через три модуля упругости второго порядка, а ангармоническая энергия — через шесть модулей упругости третьего порядка. Причем для значительной части кубических кристаллов упругие модули второго и третьего порядка экспериментально определены. Поэтому скорости релаксации фононов, рассчитанные в этой модели, являются надежной основой для интерпретации экспериментальных данных по поглощению ультразвука и фононному транспорту в кубических кристаллах.

Для характеристики упругой анизотропии кубических кристаллов ранее [15] вводился формальный фактор анизотропии $A = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12})$, где c_{ij} — упругие модули второго порядка. Однако детальный анализ упругих волн в кубических кристаллах [14] показал, что влияние кубической анизотропии на спектр и векторы поляризации колебательных мод определяется безразмерным параметром $k - 1 = \Delta C / (c_{11} - c_{44})$ (где $\Delta C = c_{12} + 2c_{44} - c_{11}$). Поскольку параметры $k - 1$ и ΔC имеют одинаковые знаки, все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной $\Delta C > 0$ и отрицательной $\Delta C < 0$ анизотропией упругих модулей второго порядка (см. табл. 1 в [14]). Для изотропных сред этот параметр равен нулю. К первому типу относятся кристаллы Ge, Si, алмаза, InSb, GaSb,

GaAs и т.д. Ко второму типу кубических кристаллов ($\Delta C < 0$) относятся кристаллы KCl, NaCl и т.д. Физической основой классификации, предложенной в [14], является качественно различная анизотропия спектров и поведение векторов поляризации в кубических кристаллах двух типов. Анализ, проведенный в [16,17] для механизма Ландау–Румера, показал, что в кубических кристаллах первого и второго типа не только спектр и поляризация фононов, но и поведение релаксационных характеристик, таких как коэффициенты поглощения ультразвука и скорости релаксации квазипоперечных колебательных мод, качественно различаются.

В настоящей работе проанализированы угловые зависимости скоростей релаксации медленных квазипоперечных фононов в механизмах ТТТ для кубических кристаллов с положительной (Ge, Si и алмаза) и отрицательной (KCl и NaCl) анизотропией упругих модулей второго порядка. Проведено сравнение величин скоростей релаксации в механизмах ТТТ с результатами, полученными для механизма Ландау–Румера [17], и найдены полные скорости релаксации для медленных квазипоперечных мод. Показано, что нет других вариантов релаксации медленных квазипоперечных мод, приводящих к зависимости типа Ландау–Румера. Расчет полных скоростей релаксации позволит рассчитать поглощение ультразвука с учетом затухания фононных состояний в кубических кристаллах и провести корректный анализ экспериментальных данных. В отличие от работ [11–13] нами проанализированы угловые зависимости скоростей релаксации фононов для двух наиболее актуальных случаев: 1) для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба; 2) для волновых векторов в диагональной плоскости. Это позволяет определить направления, в которых скорости релаксации медленной квазипоперечной моды имеют максимальные и минимальные величины.

2. Скорость релаксации поперечных фононов в механизмах ТТТ для кубических кристаллов

Возможными вариантами релаксации длинноволновых поперечных фононов в кубических кристаллах являются следующие процессы слияния двух поперечных фононов с образованием поперечного фонона:

- 1) $ST_1 + ST_2 \rightarrow ST_3$, $FT_1 + FT_2 \rightarrow FT_3$, $\omega_{q_1}^\lambda = \omega_{q_3}^\lambda - \omega_{q_2}^\lambda$,
- 2) $ST_1 + FT_2 \rightarrow FT_3$, $\omega_{q_1}^{t_2} = \omega_{q_3}^{t_1} - \omega_{q_2}^{t_1}$,
 $FT_1 + ST_2 \rightarrow ST_3$, $\omega_{q_1}^{t_1} = \omega_{q_3}^{t_2} - \omega_{q_2}^{t_2}$,
- 3) $FT_1 + FT_2 \rightarrow ST_3$, $\omega_{q_1}^{t_1} = \omega_{q_3}^{t_2} - \omega_{q_2}^{t_1}$,
- 4) $FT_1 + ST_2 \rightarrow FT_3$, $\omega_{q_1}^{t_1} = \omega_{q_3}^{t_1} - \omega_{q_2}^{t_2}$,
 $ST_1 + ST_2 \rightarrow FT_3$, $\omega_{q_1}^{t_2} = \omega_{q_3}^{t_1} - \omega_{q_2}^{t_2}$. (1)

Здесь $\omega_{q\lambda}$ — частота фонона с волновым вектором q и поляризацией волны λ . В процессах 1) участвуют

три поперечных фонона, принадлежащих либо к верхней (FT, $\lambda = t_1$), либо к нижней (ST, $\lambda = t_2$) колебательным ветвям. В изотропных средах в процессах 1) могут участвовать только коллинеарные фононы [1–4]. Учет дисперсии фононов приводит к обращению в нуль вероятности рассеяния фононов в этом механизме рассеяния. В изотропных средах процессы типа 1) могут иметь место при учете затухания фононных состояний, причем эффект затухания должен доминировать над эффектом дисперсии [1–4]. Для корректного анализа влияния затухания фононных состояний в механизме ГТТ необходимо найти суммарную частоту релаксации поперечных тепловых фононов, которая определяется всеми процессами релаксации. Анализ этого механизма [4] для изотропных сред с учетом затухания фононных состояний дает для скорости релаксации независимый от волнового вектора вклад: $v_{\text{ГТТ}}^t \sim q^0 T^4 v_{t_2}(T)$, где $v_{t_2}(T)$ — полная скорость релаксации тепловых фононов моды t_2 . В настоящей работе мы покажем, что для процессов 1) $ST_1 + ST_2 \rightarrow ST_3$ (механизм SSS) закон сохранения энергии строго выполняется и для неколлинеарных фононов. Эти процессы дают зависимости скорости релаксации длинноволновых поперечных фононов такого же вида, как и механизм Ландау–Румера: $v_{\text{SSS}}^t \sim qT^4$. Показано, что для многих кубических кристаллов этот механизм вносит преобладающий вклад в полную скорость релаксации медленной квазипоперечной моды. Процессы типа 2) (механизм SFF) аналогичны процессам релаксации поперечных фононов в механизме Ландау–Румера. Они дают зависимости скорости релаксации длинноволновых поперечных фононов вида $v_{\text{SFF}}^t \sim qT^4$ и могут конкурировать с механизмом Ландау–Румера [6]. В процессах 2) энергия рассеянного поперечного фонона равна разности энергий фононов, принадлежащих одной и той же поперечной колебательной ветви. Очевидно, что для изотропных сред такой механизм невозможен, поскольку поперечные ветви вырождены, и спектр фононов изотропен. Поэтому, чем больше кубическая анизотропия (чем значительнее параметр k отличается от единицы), тем более эффективными будут механизмы релаксации, связанные с процессами типа 1) и 2). Процессы типа 3) невозможны, так как для них нельзя обеспечить выполнение закона сохранения энергии. Процессы типа 4) аналогичны процессам релаксации продольных фононов в механизме Херринга [18,19] ($L_1 + ST_2 \rightarrow FT_3$, $\omega_{q_1}^L = \omega_{q_3}^{t_1} - \omega_{q_2}^{t_2}$). В процессах 4) энергия рассеянного поперечного фонона равна разности энергий верхней и нижней поперечных колебательных ветвей. Этот механизм приводит к зависимости скорости релаксации длинноволновых поперечных фононов вида $v_{\text{ГТТ}}^L \sim q^2 T^3$, которая менее эффективна в длинноволновом приближении, чем для механизма Ландау–Румера: $v_{\text{ГТТ}}^L \sim qT^4$ [3]. Далее приведены расчеты скоростей релаксации медленных квазипоперечных фононов для механизмов SSS и SFF в кубических кристаллах. Это позволит определить полную скорость релаксации медленных квазипоперечных фононов в длинноволновом приближении. Других вариантов релаксации (ST)-моды, приводящих к зависимости типа Ландау–Румера, нет.

Исходное выражение для скорости релаксации фононов с поляризацией λ_1 имеет вид [7]

$$v_{\text{phN}}(q_1, \lambda_1) = \frac{\pi \hbar^4}{(2\rho k_B T)^3} \frac{1}{V} \times \sum_{\substack{q_2 q_3 \\ \lambda_2 \lambda_3}} \frac{\text{sh}\left(\frac{z_1}{2}\right) \cdot \delta_{q_1+q_2+q_3,0}}{z_1 z_2 z_3 \text{sh}\left(\frac{z_2}{2}\right) \text{sh}\left(\frac{z_3}{2}\right)} \left| V_{q_1 q_2 q_3}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \right|^2 \times \left\{ 2\delta(\omega_{q_1 \lambda_1} + \omega_{q_2 \lambda_2} - \omega_{q_3 \lambda_3}) + \delta(\omega_{q_1 \lambda_1} - \omega_{q_2 \lambda_2} - \omega_{q_3 \lambda_3}) \right\}. \quad (2)$$

Здесь ρ — плотность, V — нормировочный объем, T — температура, поляризация λ принимает два значения t_1 и t_2 , $z_n = \hbar \omega_{qn}^{\lambda n} / k_B T$. В выражении (2) мы учитываем только первое слагаемое в фигурных скобках, которое соответствует слиянию двух поперечных фононов и рождению поперечного фонона. Процессы распада поперечного фонона на два поперечных не рассматриваются — они могут быть существенны лишь для тепловых и высокочастотных фононов.

Спектр фононов с поляризацией λ и с волновым вектором, величина которого гораздо меньше дебаевского волнового вектора q_d , в модели анизотропного континуума может быть представлена в виде

$$\omega_q^\lambda = S_\lambda(\theta, \varphi) q. \quad (3)$$

Анизотропия спектра определяется анизотропией фазовой скорости фононов $S_\lambda(\theta, \varphi)$, зависящей от угловых переменных θ и φ вектора \mathbf{q} . В системе координат, связанной с ребрами куба, имеем [14]

$$S_\lambda(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon_\lambda \right)^{1/2}, \quad \varepsilon_{t_1, t_2} = \frac{1}{3} + Z_{t_1, t_2},$$

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

$$q = \left\{ \frac{1 + 4.5(k^2 - 1)\xi + 13.5\eta(1 - k)^2(1 + 2k)}{\sqrt{(1 + 3(k^2 - 1)\xi)^3}} \right\},$$

$$r = \sqrt{1 + 3(k^2 - 1)\xi}, \quad k = \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{11} - c_{44}}, \quad (4)$$

где c_{ij} — упругие модули второго порядка, $\xi = n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2$ 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. Индексы t_1 и t_2 соответствуют „быстрой“ (верхней) и „медленной“ (нижней) поперечным колебательным модам. Векторы поляризации фононов различных колебательных ветвей определяются выражениями [14]

$$e_j^\lambda = \frac{1}{A_\lambda} \left\{ \frac{n_j}{\psi_j^\lambda} \right\}, \quad A_\lambda = \pm \sqrt{\sum_j \frac{n_j^2}{(\psi_j^\lambda)^2}},$$

$$(\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}) = \frac{1}{A_\lambda} \sum_j \frac{n_j^2}{\psi_j^\lambda}, \quad \psi_j^\lambda = \varepsilon_\lambda + (k - 1)n_j^2. \quad (5)$$

Как видно из выражений (4) и (5), именно параметр $k - 1$ характеризует влияние упругой анизотропии на спектр и векторы поляризации колебательных мод кубических кристаллов. Анализ, проведенный в [14], показал, что вклад продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым. Его максимальные значения, согласно [14], составляют 16.5% для Ge, 10% для Si и 8% для алмаза, а в кристаллах KCl — до 27%. Поэтому далее при расчете скоростей релаксации учтем вклад продольной компоненты в поперечно-продольные колебания в линейном по этой компоненте приближении. Для определения скорости $S_\lambda(\theta_3, \varphi_3)$ из закона сохранения импульса выразим угловые переменные θ_3 и φ_3 вектора \mathbf{q}_3 через угловые переменные θ_1, φ_1 и θ_2, φ_2 волновых векторов \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 и определим соответствующие кубические гармоники

$$\begin{aligned} \xi_3 &= (1 - \psi_3)\psi_3 + \psi_4^2, \quad \eta_3 = \psi_3\psi_4^2, \\ \psi_3 &= (\cos \theta_3)^2 = (\cos \theta_2 + y \cos \theta_1)^2 / (1 - y^2 + 2y \cos \theta_{12}), \\ y &= q_1/q_2, \quad (6) \\ \psi_4 &= (\sin \theta_3)^2 \sin \varphi_3 \cos \varphi_3 = \frac{(\sin \theta_2 \sin \varphi_2 + y \sin \theta_1 \sin \varphi_1)}{(1 + y^2 + 2y \cos \theta_{12})} \\ &\quad \times (\sin \theta_2 \cos \varphi_2 + y \sin \theta_1 \cos \varphi_1), \\ \cos \theta_{12} &= (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) = \sin \theta_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \sin \theta_2 + \cos \theta_1 \cos \theta_2. \end{aligned}$$

После несложных вычислений для механизмов релаксации ТТТ получим

$$\begin{aligned} v_{\text{ТТТ}}^\lambda &= B_{\text{ТТТ}}^\lambda z_1 T^5, \\ B_{\text{ТТТ}}^\lambda(z_1, T, \theta_1, \varphi_1) &= B_{\text{ТТТ}}^\lambda J_{\text{ТТТ}}^\lambda(z_1, T, \theta_1, \varphi_1), \quad z_1^\lambda = \frac{\hbar \omega_{q_1}^\lambda}{k_B T}, \\ B_{\text{ТТТ}}^{\lambda_2}(\theta_1, \varphi_1) &= \frac{\pi^3 k_B^5}{15 \hbar^4 \rho^3 S_{t_2}(\theta_1, \varphi_1) (S_{100}^t)^8}, \quad S_{100}^t = \left(\frac{c_{44}}{\rho}\right)^{1/2}, \\ J_{\text{ТТТ}}^\lambda(z_1, T) &= \frac{15}{16\pi^4} \left\{ \frac{\text{sh}(0.5z_1)}{0.5z_1} \right\} \sum_{\lambda_2 \lambda_3} \int_0^{z_1} dz_2 F(z_1, z_2) \\ &\quad \times \int_{-1}^1 dx \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta(\cos \theta_{12} - S_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{**}) \frac{I_{\text{ТТТ}}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(\theta_2, \varphi_2)}{\left(\tilde{S}_2^{\lambda_2}\right)^6 \left(\tilde{S}_3^{\lambda_3}\right)^2}. \quad (7) \end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned} F(z_1, z_2) &= z_2^4 \left[\text{sh} \left(\frac{z_2}{2} \right) \text{sh} \left(\frac{z_1 + z_2}{2} \right) \right]^{-1}, \\ z_2 &= \frac{\hbar \omega_{q_2}^{\lambda_2}}{k_B T}, \quad x = \cos \theta_2, \\ S_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{**} &= \frac{\tilde{S}_1^{\lambda_1} \tilde{S}_2^{\lambda_2}}{(\tilde{S}_3^{\lambda_3})^2} + \left[\left(\frac{\tilde{S}_2^{\lambda_2}}{\tilde{S}_3^{\lambda_3}} \right)^2 - 1 \right] \frac{1}{2y} + 0.5y \left[\left(\frac{\tilde{S}_2^{\lambda_2}}{\tilde{S}_3^{\lambda_3}} \right)^2 - 1 \right], \\ \tilde{S}_1^{\lambda_1} &= \frac{S_{\lambda_1}}{S_{100}^t}, \end{aligned}$$

$z_d^\lambda = \frac{\hbar \omega_d^\lambda}{k_B T}$, ω_d^λ — дебаевская частота для поперечных фононов. В точном выражении для матричного элемента трехфононных процессов рассеяния [20] учтем только члены, линейные по продольным компонентам квазипоперечных колебаний, а слагаемыми, пропорциональными квадратичным комбинациям величин $(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1)$, $(\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2)$, $(\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_3)$, пренебрежем. Погрешность этого приближения составляет порядка 1% для кристаллов Ge, InSb, GaSb и GaAs и менее 1% для Si и алмаза. Тогда для квадрата матричного элемента найдем

$$\begin{aligned} I_{\text{ТТТ}}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) &= (2q_1 q_2^2)^{-2} |V_{q_1 q_2 q_3}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left\{ \tilde{c}_{111} \sum_i e_{1i} e_{2i} e_{3i} n_{1i} n_{2i} (n_{2i} + y n_{1i}) \right. \\ &\quad + \tilde{c}_{112} \sum_i \left[e_{1i} e_{2i} n_{1i} n_{2i} \frac{q_3}{q_2} (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_3) + e_{1i} e_{3i} n_{1i} \right. \\ &\quad \times (n_{2i} + y n_{1i}) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) + e_{2i} e_{3i} n_{2i} (n_{2i} + y n_{1i}) (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) \left. \right] \\ &\quad \times \tilde{c}_{155} \sum_i \left[e_{1i} e_{2i} e_{3i} (n_{1i} (1 + 2y \cos \theta_{12}) \right. \\ &\quad + n_{2i} (y + 2 \cos \theta_{12})) + e_{1i} e_{2i} (n_{2i} + y n_{1i}) [n_{1i} (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_2) \\ &\quad + n_{2i} (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_1)] + e_{1i} e_{3i} n_{2i} [n_{1i} ((\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) + 2y (e_2 n_{1i})) \\ &\quad + n_{2i} (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1)] + e_{2i} e_{3i} n_{1i} [n_{2i} (2(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) + y (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2)) \\ &\quad + y n_{1i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2)] \left. \right] + (\tilde{c}_{155} - \Delta C) \sum_i n_{1i} n_{2i} (n_{2i} + y n_{1i}) \\ &\quad \times [e_{1i} (\mathbf{e}_2 \mathbf{e}_3) + e_{2i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_3) + e_{3i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)] + (c_{144} + c_{456}) \\ &\quad \times [y (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1) (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_2) + (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_1) (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_3) \\ &\quad + \frac{q_3}{q_2} (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_3) (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1) \left. \right] + (c_{12} + c_{144}) \\ &\quad \times [(\mathbf{e}_2 \mathbf{e}_3) (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) (1 + y \cos \theta_{12}) + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_3) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) \\ &\quad \times (y + \cos \theta_{12}) + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) \frac{q_3}{q_2} (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_3) \cos \theta_{12} \left. \right] \\ &\quad + (c_{44} + c_{456}) [(\mathbf{e}_2 \mathbf{e}_3) (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) [(y + 2 \cos \theta_{12}) \\ &\quad + y (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) \cos \theta_{12}] + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) [(\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_1) (1 + y \cos \theta_{12}) \\ &\quad + (\mathbf{e}_3 \mathbf{n}_2) (y + \cos \theta_{12})] + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_3) ((\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1) \\ &\quad \times (1 + 2y \cos \theta_{12}) + (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) \cos \theta_{12}) \left. \right\}^2, \quad (8) \end{aligned}$$

где

$$y = \frac{q_1}{q_2} = \frac{z_1}{z_2} \frac{\tilde{S}_2^{\lambda_2}}{\tilde{S}_1^{\lambda_1}}, \quad \tilde{c}_{112} = c_{112} - c_{123} - 2c_{144},$$

$$\tilde{c}_{155} = c_{155} - c_{144} - 2c_{456},$$

$$\tilde{c}_{111} = c_{111} - 3c_{112} + 2c_{123} + 12c_{144} - 12c_{155} + 16c_{456},$$

$$\Delta C = c_{12} + 2c_{44} - c_{11}, \quad (9)$$

c_{ijk} — термодинамические модули упругости третьего порядка, $\mathbf{e}_{1,2,3}$ — векторы поляризации. Формулы (6)–(9) позволяют рассчитать скорости релаксации квазипоперечных фононов для всех вариантов релаксации в механизмах ТТТ. Отметим, что слагаемые, содержащие модули упругости третьего порядка \tilde{c}_{111} , \tilde{c}_{112} , \tilde{c}_{155} и ΔC , соответствуют анизотропному рассеянию. Эти члены отличаются кубические кристаллы от изотропной среды: они обращаются в нуль при переходе к модели изотропной среды. Остальные слагаемые в формуле (8) соответствуют изотропному рассеянию.

В длинноволновом пределе $y \ll 1$ ($q_1 \ll q_2, q_3$) при температурах, гораздо меньших температуры Дебая, интеграл по z_2 точно вычисляется. Тогда для скоростей релаксации фононов в процессах SSS ($\lambda_1 = t_2$ и $\lambda_2 = \lambda_3 = t_2$) и SFF ($\lambda_1 = t_2$ и $\lambda_2 = \lambda_3 = t_1$) получим

$$v_{\text{ТТТ}}^{t_2} = B_{\text{ТТТ}}^{t_2} z_1 T^5, \quad B_{\text{ТТТ}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) = B_{\text{ОТТТ}}^{t_2} J_{\text{ТТТ}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1)$$

$$= B_{\text{ОТТТ}}^{t_2} (J_{\text{SSS}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) + J_{\text{SFF}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1)), \quad (10)$$

$$J_{\text{ТТТ}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) = \sum_{\lambda_2} \int_{-1}^1 dx \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta(\cos \theta_{12} - S_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2}^{**})$$

$$\times \frac{I_{\text{ТТТ}}^{t_2 \lambda_2 \lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2)}{(\tilde{S}_2^{\lambda_2})^8}, \quad x = \cos \theta_2, \quad (11)$$

$$S_{t_2 \lambda_2 \lambda_2}^{**} = \frac{\tilde{S}_1^{t_2}}{\tilde{S}_2^{\lambda_2}} - \Delta_{\lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2),$$

$$\Delta_{\lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) = \lim_{y \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{y} \left[\frac{\tilde{S}_3^{\lambda_2} - \tilde{S}_2^{\lambda_2}}{\tilde{S}_2^{\lambda_2}} \right] \right\}. \quad (12)$$

Здесь уместно отметить, что для процессов релаксации (1) и (2) величина Δ_{λ_2} играет важную роль: для механизма SSS она обеспечивает возможность взаимодействия неколлинеарных фононов, а для механизма SFF существенно расширяет область углов, в которых длинноволновые фононы моды t_2 могут рассеиваться на тепловых фононах верхней колебательной моды. Проведенные оценки показали, что для направлений типа [001] ($\theta_1 = 0, \varphi_1 = 0$) и [101] ($\theta_1 = \pi/4, \varphi_1 = 0$) максимальные величины Δ_{λ_2} составляют приблизительно 0.6 для кристаллов Ge и InSb и 0.18 для алмаза. Поэтому можно ожидать, что в таких упругоанизотропных кристаллах, как Ge и InSb ($k \cong 1.8$), механизмы ТТТ будут более существенны, чем для алмаза ($k = 1.4$). В длинноволновом приближении для процессов рассеяния (1) и (2)

при $\mathbf{n}_2 \cong \mathbf{n}_3$ и $\lambda_2 = \lambda_3$ имеем $\mathbf{e}_2 \cong \mathbf{e}_3$. При этом выражение (8) значительно упрощается

$$I_{\text{ТТТ}}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) = \frac{1}{4} \left\{ \tilde{c}_{111} \sum_i e_{1i} e_{2i}^2 n_{1i} n_{2i}^2 \right.$$

$$+ \tilde{c}_{112} \sum_i [2e_{1i} e_{2i} n_{1i} n_{2i} (e_{2n_2}) + e_{2i}^2 n_{2i}^2 (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1)]$$

$$+ \tilde{c}_{155} \sum_i [e_{1i} e_{2i}^2 (n_{1i} + 2n_{2i} \cos \theta_{12}) + 2e_{1i} e_{2i} n_{2i}$$

$$\times [n_{1i} (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) + n_{2i} (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1)] + 2e_{2i}^2 n_{1i} n_{2i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2)]$$

$$+ (\tilde{c}_{155} - \Delta C) \sum_i [n_{1i} n_{2i}^2 (e_{1i} + 2e_{2i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2))]$$

$$+ 2(c_{144} + c_{456}) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1) (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) + (c_{12} + c_{144})$$

$$\times [(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) + 2(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) \cos \theta_{12}] + 2(c_{44} + c_{456})$$

$$\left. \times ((\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) \cos \theta_{12} + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) [(\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1) + (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) \cos \theta_{12}]) \right\}^2. \quad (13)$$

В приближении чистых мод $(\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) = (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) = 0$, рассмотренном в [12], имеем

$$I_{\text{ТТТ}}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) = \frac{1}{4} \left\{ \tilde{c}_{111} \sum_i e_{1i} e_{2i}^2 n_{1i} n_{2i}^2 \right.$$

$$+ \tilde{c}_{155} \sum_i [e_{1i} e_{2i}^2 (n_{1i} + 2n_{2i} \cos \theta_{12}) + 2e_{1i} e_{2i} n_{2i}^2$$

$$\times (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1) + 2e_{2i}^2 n_{1i} n_{2i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2)] + (\tilde{c}_{155} - \Delta C)$$

$$\times \sum_i n_{1i} n_{2i}^2 [e_{1i} + 2e_{2i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)] + 2(c_{44} + c_{456})$$

$$\left. \times [(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) \cos \theta_{12} + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1)] \right\}^2. \quad (14)$$

При переходе к модели изотропной среды [10] слагаемые, содержащие модули упругости третьего порядка \tilde{c}_{111} , \tilde{c}_{155} и ΔC , обращаются в нуль, поэтому в (14) остается только последнее слагаемое. Следует отметить, что для рассеяния коллинеарных фононов $\mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_2$, и это слагаемое тождественно обращается в нуль, поскольку в изотропных средах распространяются чистые моды, для которых величины $(\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_2) = (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) = 0$. Итак, при рассеянии коллинеарных фононов в изотропных средах квадрат матричного элемента тождественно обращается в нуль для произвольного направления волнового вектора фонона. Нетрудно убедиться, что для кубических кристаллов выражение (13) обращается в нуль при рассеянии коллинеарных фононов в направлениях [001] и [101]. Для этого достаточно в (13) подставить выражения для векторов поляризации (так, например, в направлении [101] $\mathbf{e}_{q_1}^i = (0, 1, 0)$, $\mathbf{e}_{q_1}^{t_2} = (1/\sqrt{2}, 0, -1/\sqrt{2})$) и воспользоваться условием $\mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_2$. Однако для других направлений матричный элемент оказывается отличным

от нуля. Так, например, для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба, квадраты матричных элементов для механизмов релаксации SSS ($I_{\text{TTT}}^{t_2 t_2}(\theta_1, 0, \theta_1, 0)$) и SFF ($I_{\text{TTT}}^{t_1 t_1}(\theta_1, 0, \theta_1, 0)$) при рассеянии коллинеарных фононов отличны от нуля при $\theta_1 \neq 0, \pi/4$. В противоположность этому во всех кристаллах второй группы (в том числе в KCl и NaCl) для волновых векторов в плоскости грани куба медленная мода ST является чисто поперечной модой с вектором поляризации, перпендикулярным рассматриваемой грани куба (см. [14]), и квадрат матричного элемента для механизмов релаксации SSS и SFF равен нулю при всех значениях угла θ_1 . Для произвольного направления волнового вектора \mathbf{n}_1 анализ выражения (13) показал, что матричный элемент при рассеянии коллинеарных фононов в механизмах релаксации SSS и SFF отличен от нуля, если медленная мода является квазипоперечной — с отличной от нуля продольной компонентой. Он равен нулю, если медленная мода ST является чисто поперечной модой.

Сравним выражение (14) с результатом [12]. Для частного случая [12], когда волновой вектор \mathbf{q}_1 направлен вдоль оси z ($\mathbf{n}_1 = \{0, 0, 1\}$), величины $e_{1i} n_{1i} = 0$ для всех i , а также $\cos \theta_{12} = \cos \theta_2$. При этом слагаемое, пропорциональное модулю \tilde{c}_{111} в (14), пропадает, и для квадрата матричного элемента получим

$$I_{\text{TTT}}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) = \left\{ \tilde{c}_{155} \sum_i [e_{1i} e_{2i}^2 n_{2i} \cos \theta_2 + e_{1i} e_{2i} n_{2i}^2 (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1) + e_{2i}^2 n_{1i} n_{2i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2)] + (\tilde{c}_{155} - \Delta C) \sum_i n_{1i} n_{2i}^2 e_{2i} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) + (c_{44} + c_{456}) [(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) \cos \theta_2 + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) (\mathbf{e}_2 \mathbf{n}_1)] \right\}^2. \quad (15)$$

В обозначениях [12] $\tilde{c}_{155} = P_1$, $\Delta C = 2D$ и $c_{44} + c_{456} = I$, поэтому в (15) для механизмов ТТТ входят те же модули упругости третьего порядка, что и в [12]. Однако угловые зависимости матричного элемента (15) для механизмов ТТТ оказываются существенно иными, нежели в [12]. Для того чтобы убедиться в этом, определим векторы поляризации чистых мод, соответствующих модам t_1 и t_2 в кубических кристаллах, согласно [14]

$$\mathbf{e}_0^1 = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0),$$

$$\mathbf{e}_0^2 = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta), \quad (16)$$

где вектор \mathbf{e}_0^1 перпендикулярен плоскости $\varphi = \text{const}$, а \mathbf{e}_0^2 лежит в плоскости $\varphi = \text{const}$ и перпендикулярен вектору $\mathbf{n} = (\sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi), \cos(\theta))$. Подставим выражения (16) в (15), тогда для матричных элементов в направлениях типа [001] ($\theta_1 = 0, \varphi_1 = 0$) получим различные выражения для процессов релаксации (1) и (2). Однако в [12] для матричного элемента во всех вариантах релаксации поперечных фононов в процессах (1) и (2) получен одинаковый результат после

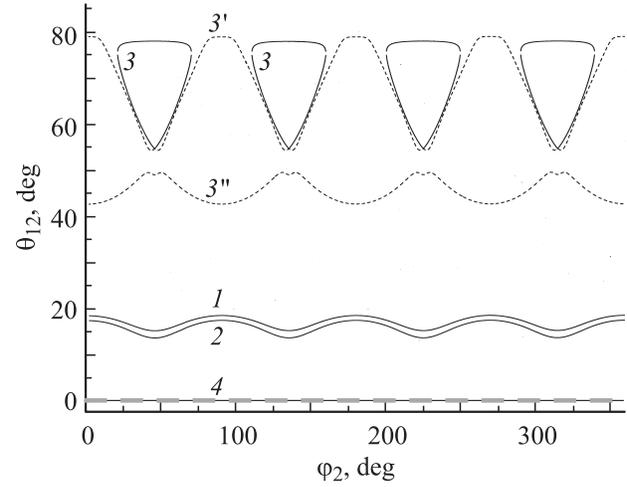


Рис. 1. Зависимости угла θ_{12} между векторами падающего в направлении типа [001] ($\theta_1 = 0, \varphi_1 = 0$) и рассеянного (θ_2, φ_2) фононов от угла φ_2 согласно решениям уравнений (17); для процессов релаксации SSS в кристаллах Ge (1), Si (2) и KCl (3); для процессов релаксации SFF в кристаллах KCl (3', 3''). Кривые 4 — для кристаллов Ge, Si, алмаза, NaCl и KCl в механизмах релаксации SSS и SFF.

двух процедур усреднения: сначала по векторам поляризации фононов, затем по углам φ_2 . Очевидно, что процедура усреднения матричного элемента по векторам поляризации фононов [12] не является корректной для кубических кристаллов, а процедура усреднения по углам φ_2 вносит неконтролируемое приближение (см. (17) и (18)).

Для вычисления интеграла $J_{\text{TTT}}^{\lambda}(\theta_1, \varphi_1)$ в (11) необходимо сначала найти корни уравнения

$$F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1) = \cos \theta_{12} - S_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2}^{**}(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1) = 0 \quad \text{при } -1 \leq x \leq 1, \quad x = \cos \theta_2 \quad (17)$$

и снять интеграл по x при помощи δ -функции (при этом корни уравнения (17) x_j становятся функциями углов φ_2, θ_1 и φ_1). Тогда выражение для $J(\theta_1, \varphi_1)$ примет вид

$$J_{\text{TTT}}^{\lambda}(\theta_1, \varphi_1) = \sum_j \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \frac{I_{\text{TTT}}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, x_j, \varphi_2)}{(\tilde{S}_2^{\lambda_2})^8 |F_j^1|}, \quad F_j^1 = \left. \frac{dF(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}{dx} \right|_{x=x_j(\varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}. \quad (18)$$

Очевидно, что при учете кубической анизотропии в законе сохранения энергии эта процедура может быть проведена только численным образом. Численный анализ уравнения (17) показал, что для медленной поперечной моды в процессах релаксации SSS ($\lambda_1 = t_2$ и $\lambda_2 = t_2$) и SFF ($\lambda_1 = t_2$ и $\lambda_2 = t_1$) оно имеет решения и для неколлинеарных фононов. Как видно из рис. 1, в направлениях типа [001] ($\theta_1 = 0, \varphi_1 = 0$) для процессов релаксации

SSS в кристаллах Ge и Si существуют два решения: одно из них соответствует взаимодействию коллинеарных фононов ($\theta_{12} = \theta_2 = 0$, рис. 1, кривая 4), другое — неколлинеарных фононов (рис. 1, кривые 1, 2). Для процессов релаксации SFF в этих кристаллах существует только решение, соответствующее взаимодействию коллинеарных фононов (рис. 1, кривые 4). Для кристаллов алмаза и NaCl с меньшей анизотропией гармонической энергии в процессах релаксации SSS и SFF в направлениях типа [001] могут принимать участие только коллинеарные фононы (рис. 1, кривые 4). В более анизотропных кристаллах KCl для механизмов релаксации SSS и SFF закон сохранения энергии допускает взаимодействие как коллинеарных (рис. 1, кривые 4), так и неколлинеарных фононов (рис. 1, кривые 3, 3' и 3''). Причем для обоих механизмов релаксации существуют по три решения. Проведенный анализ показал, что доминирующий вклад в скорости релаксации SSS и SFF вносит взаимодействие неколлинеарных фононов. В направлениях типа [101] ($\theta_1 = \pi/4$, $\varphi_1 = 0$) решения, соответствующие взаимодействию коллинеарных фононов, существуют только для механизма SSS; для механизма SFF в рассмотренных кристаллах они отсутствуют.

Как показано в [18], имеется более простой вариант расчета скоростей релаксации фононов, который позволяет избавиться от процедуры нахождения корней уравнения (17) $F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1) = 0$. Однако для этого требуется вычисление двукратного интеграла $J_{\text{TTL}}^2(\theta_1, \varphi_1)$ вместо однократного. Он заключается в замене δ -функции, входящей в выражение (12а), на ее представление в виде предельного перехода от лоренцевской или гауссовской функций

$$\delta(F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1))^2 + \varepsilon^2},$$

$$\delta((x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\sqrt{\pi\varepsilon}} \times \exp\left(-\frac{(F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1))^2}{4\varepsilon}\right). \quad (19)$$

Численный анализ показал, что обе аппроксимации дают одинаковый результат, но гауссовское приближение δ -функции позволяет сократить время расчета скоростей релаксации в 2 раза, поскольку на крыльях она убывает существенно быстрее, чем лоренцевская. Отметим, что вычисленные величины $v_{\text{TLL}}^2(\theta_1, \varphi_1)$ для механизма Ландау–Румера в варианте с затуханием согласуются с точными вычислениями в пределах погрешности, не превышающей 0.1% при $\varepsilon = 10^{-4}$ [18]. Дело в том, что для механизма Ландау–Румера величина $S_{\text{TLL}}^{**}(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1) \leq 1$ всегда меньше или равна единице. Закон сохранения энергии выполняется как в изотропном приближении, так и при точном учете кубической анизотропии. Для этого механизма величина $\Delta_L(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2)$ является плавной функцией углов, и уравнение (17) для различных значений θ_1 и φ_1 имеет либо одно, либо два решения, а интервалы значений

углов φ_2 , в которых корни имеют место, достаточно велики [17]. В отличие от этого случая для механизмов SFF и SSS знакопеременная функция Δ_{λ_2} резко меняется как функция углов θ_2 и φ_2 в некоторых интервалах изменения θ_1 ($\varphi_1 = 0, \pi/4$). Число корней уравнения (17) значительно превышает единицу, а интервалы значений углов φ_2 , в которых некоторые из корней имеют место, малы. При $\varphi_2 = \pi/4$ и $\theta_2 = \theta_{111}$ функция $\Delta_{\lambda_2}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2)$ имеет конечный разрыв, связанный с наличием точки пересечения спектров квазиперечных мод, а функция $\frac{dF(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}{dx}$ претерпевает уже бесконечный разрыв в этой точке. В связи с отмеченными обстоятельствами при численном интегрировании (18) с использованием процедуры вычисления корней функция $v_{\text{SSS}}^2(\theta_1, \varphi_1)$ в некоторых узких интервалах углов θ_1 имеет вид „гребенки“. Поэтому введение малого, но конечного затухания фононных состояний для механизма SSS является необходимой процедурой усреднения. В идеальных кристаллах затухание фононных состояний обусловлено ангармоническими процессами рассеяния. Как показали экспериментальные исследования [21–23], ангармонические процессы вносят доминирующий вклад в коэффициенты поглощения ультразвука при $T > 10$ К. При $T \sim 100$ К и $\omega \sim 1$ GHz параметр $\omega_q^4 \tau_2 \approx 1$, а при более высоких температурах происходит переход от режима Ландау–Румера $\omega_q^4 \tau_2 < 1$ к режиму Ахиезера $\omega_q^4 \tau_2 > 1$ [24]. При этом зависимости коэффициентов поглощения ультразвука от частоты и температуры качественно изменяются. Оценки, полученные в работах [11–13] из измерений коэффициентов поглощения ультразвука, показывают, что значения параметра $(\omega_q^4 \tau_2)^{-1}$ в режиме ангармонического рассеяния лежат в интервале $10^{-3} - 10^{-1}$. Физически разумным пределом параметра $\varepsilon \approx (\omega_q^4 \tau_2)^{-1}$ для механизма SFF является величина 10^{-6} , а для механизма SSS — $\varepsilon = 10^{-8}$. Вычисленные в этом варианте величины скоростей релаксации $v_{\text{SFF}}^2(\theta_1, \varphi_1)$ для всех кристаллов и $v_{\text{SSS}}^2(\theta_1, \varphi_1)$ для кристаллов второй группы согласуются с расчетами по формулам (17) и (18) в пределах погрешности, не превышающей 1%. Для кристаллов первой группы величины $v_{\text{SSS}}^2(\theta_1, \varphi_1)$, рассчитанные с учетом затухания ($\varepsilon = 10^{-8}$), согласуются с расчетами по формулам (17) и (18) только после учета вклада, обусловленного коллинеарными фононами. В этом случае для механизма SSS максимальная погрешность не превышает 10%. Исключение из этого правила представляет направление [001]: для рассеяния коллинеарных фононов ($\theta_{12} = \theta_2 = 0$) результаты расчетов $v_{\text{SSS}}^2(0, 0)$ и $v_{\text{SFF}}^2(0, 0)$ зависят от величины параметра затухания. Дело в том, что для этого случая квадрат матричного элемента (13) тождественно обращается в нуль. Поэтому при точном выполнении закона сохранения энергии скорости релаксации $v_{\text{SSS}}^2(0, 0)$ и $v_{\text{SFF}}^2(0, 0)$ обращаются в нуль, если не возникает решений, соответствующих взаимодействию неколлинеарных фононов. Однако учет малого, но конечного затухания приводит к пренебрежимо малым по сравнению со вкладом механизма Ландау–Румера, но конечным

значениям этих величин за счет малоуглового рассеяния фононов. Далее случаи взаимодействия коллинеарных и неколлинеарных фононов мы обсудим применительно к каждому из рассмотренных кристаллов.

Прежде чем переходить к анализу угловых скоростей релаксации, следует сделать несколько замечаний относительно векторов поляризации квазиперечных мод в кубических кристаллах. Дело в том, что формулы (4) определяют компоненты векторов поляризации с точностью до знака. В определенных интервалах изменения углов θ и φ (для угла φ такой интервал равен $\pi/4$) все компоненты векторов поляризации одновременно меняют знак на противоположный (т.е. вектор \mathbf{e} меняется на $-\mathbf{e}$). Как видно из выражения (13), в матричный элемент для процессов релаксации (1) и (2) входят только квадратичные комбинации по векторам поляризации \mathbf{e}_2 , поэтому такая смена знака не скажется на матричном элементе. Однако для других вариантов ангармонических процессов рассеяния с участием квазиперечных фононов ситуация может быть иной. Максимальные значения продольных компонент квазиперечных мод не превышают 17% для кристаллов Ge, GaSb, InSb и GaAs и 27% для KCl. Однако величины и угловые зависимости компонент векторов поляризации e^{t_1} и e^{t_2} квазиперечных мод и соответствующих им чистых мод $e_0^{t_1}$ и $e_0^{t_2}$ различаются более значительно (см. рис. 4 в [14]). В [14] показано, что для волновых векторов, лежащих в плоскостях с углом $\varphi \neq 0, \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$, обе квазиперечные моды являются смешанными поперечно-продольными модами с точкой вырождения в направлении [001]. Они могут быть классифицированы как „быстрые“ и „медленные“ моды, поскольку для них $S_{t_1}(\theta, \varphi) \geq S_{t_2}(\theta, \varphi)$. Их векторы поляризации \mathbf{e}^{t_1} и \mathbf{e}^{t_2} в значительной степени отличаются от векторов поляризации чистых мод $\mathbf{e}_0^{t_1}$ и $\mathbf{e}_0^{t_2}$ (см. (15)). Так, например, для кристаллов первого типа вектор поляризации быстрой квазиперечной моды \mathbf{e}^{t_1} при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0^{t_1}$, т.е. к направлению, перпендикулярному плоскости $\varphi = \text{const}$, а при увеличении угла θ он отклоняется от вектора $\mathbf{e}_0^{t_1}$ и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0^{t_2}$, т.е. переходит в плоскость $\varphi = \text{const}$. С другой стороны, вектор поляризации медленной моды \mathbf{e}^{t_2} при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0^{t_2}$, лежащему в плоскости $\varphi = \text{const}$, а при увеличении угла θ он выходит из этой плоскости и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0^{t_1}$, т.е. к направлению, перпендикулярному плоскости $\varphi = \text{const}$. Чем ближе угол φ к значению $\pi/4$, тем более резко изменяются угловые зависимости компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{t_1} и \mathbf{e}^{t_2} в окрестности угла $\theta = \theta_{111}$ (см. рис. 4 в [14]). Для волновых векторов \mathbf{q}_1 , лежащих в диагональной плоскости ($\varphi_1 = \pi/4$), в кристаллах первого типа медленная мода t_2 в области углов $0 < \theta_1 < \theta_{111}$ и $\pi - \theta_{111} < \theta_1 < \pi$ (θ_{111} — угол между осью Z и направлением [111]) является квазиперечной модой с вектором поляризации $\mathbf{e}_{q_1}^{t_2}$, лежащим в диагональной плоскости, а в области углов $\theta_{111} < \theta_1 < \pi - \theta_{111}$ она является чистой модой с вектором поляризации, перпендикулярным диагональной плоскости ($\mathbf{e}_{q_1}^{t_2} = (-1/\sqrt{2})$,

$1/\sqrt{2}, 0$). В кристаллах второго типа ситуация обратная [14]. Поэтому использование приближения чистых мод [11–13] может приводить к большой погрешности для угловых зависимостей скоростей релаксации в механизмах ТТТ. Далее мы покажем, что в связи с отмеченным в [14] поведением векторов поляризации на угловых зависимостях скоростей релаксации для механизмов ТТТ в направлениях типа [111] появляются резкие особенности.

3. Результаты численного анализа

Формулы (10)–(13) и (17)–(19) позволяют рассчитать коэффициенты $B_{\text{ТТТ}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1)$, которые характеризуют зависимости скоростей релаксации от направления волнового вектора квазиперечных фононов для механизмов ТТТ в различных приближениях. Мы сравним вклады механизмов SSS и SFF с механизмом Ландау–Румера [18] и найдем полную скорость релаксации медленной квазиперечной моды

$$v_{t_2}(z_1, T, \theta_1, \varphi_1) = v_{\text{SSS}}^{t_2} + v_{\text{SFF}}^{t_2} + v_{\text{TLL}}^{t_2} = B_{t_2}(\theta_1, \varphi_1) z_1 T^5, \quad (20)$$

$$B_{t_2}(\theta_1, \varphi_1) = B_{\text{SSS}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) + B_{\text{SFF}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) + B_{\text{TLL}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) \\ = B_{\text{0TLL}}^{t_2} (J_{\text{SSS}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) + J_{\text{SFF}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1)) + B_{\text{0TLL}} J_{\text{TLL}}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1);$$

$$B_{\text{0TLL}}^{t_2} = \frac{\pi^3 k_B^5}{15 \hbar^4 \rho^3 S_{t_2}(\theta_1, \varphi_1) \langle S_L \rangle^8},$$

$$B_{\text{0TLL}}^{t_2} / B_{\text{0TLL}}^{t_2} = \frac{\langle S_L \rangle^8}{(S_{100}^t)^8} \approx \left(\frac{c_{11}}{c_{44}} \right)^4. \quad (21)$$

Коэффициент $B_{t_2}(\theta_1, \varphi_1)$ характеризует анизотропию полной скорости релаксации моды t_2 . Соответствующие

Таблица 1. Значения термодинамических модулей упругости для исследованных кубических кристаллов (в единицах 10^{12} dyn/cm^2) [2,25]

Модуль упругости	Ge	Si	Алмаз	KCl	NaCl
c_{11}	1.289	1.657	10.76	0.398	0.487
c_{12}	0.483	0.638	1.25	0.062	0.124
c_{44}	0.671	0.796	5.758	0.0625	0.126
ΔC	0.54	0.57	2.01	-0.211	-0.11
c_{111}	-7.10	-8.25	-62.6	-7.01	-8.8
c_{112}	-3.89	-4.51	-22.6	-0.571	-0.571
c_{123}	-0.18	-0.64	1.12	0.284	0.284
c_{144}	-0.23	0.12	-6.74	0.127	0.257
c_{155}	-2.92	-3.10	-28.6	-0.245	-0.611
c_{456}	-0.53	-0.64	-8.23	0.118	0.271
\tilde{c}_{155}	-1.63	-1.9	-5.4	-0.61	-1.41
\tilde{c}_{111}	28.01	32.4	138.1	1.62	8.23
\tilde{c}_{112}	-3.25	-4.1	-10.24	-1.11	-1.37
$c_{456} + c_{44}$	0.14	0.156	-2.47	0.181	0.397
$\tilde{c}_{155} - \Delta C$	-2.17	-2.47	-7.41	-0.4	-1.3
$k - 1$	0.87	0.67	0.4	-0.63	-0.31

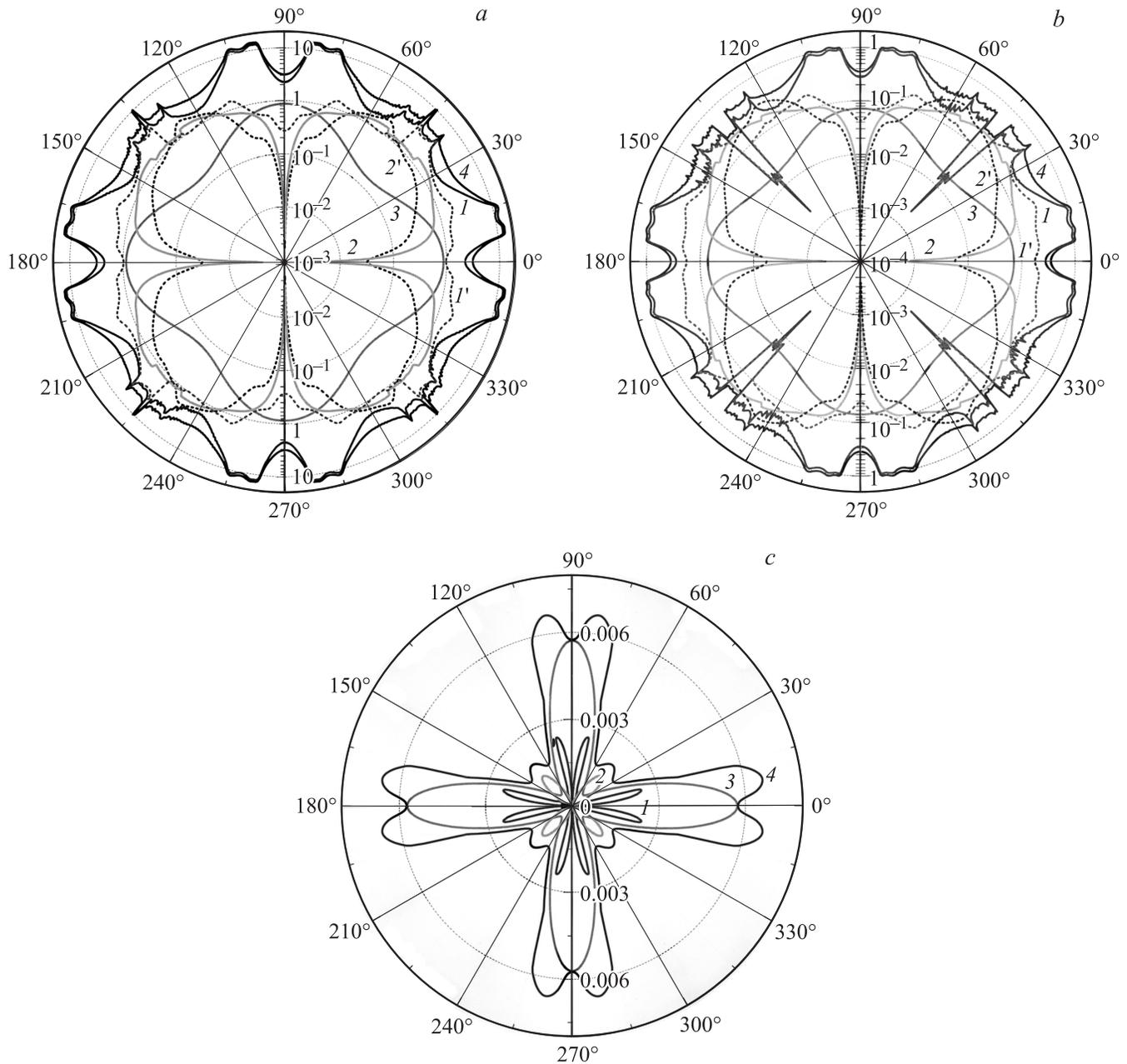


Рис. 2. Угловые зависимости скоростей релаксации медленной квазиперечной моды в кристаллах Ge (a), Si (b) и алмаза (c) для волновых векторов в плоскости грани куба, 1 — для механизма релаксации SSS, 2 — для механизма релаксации SFF, 3 — для механизма Ландау–Румера, 4 — полные скорости релаксации. Штриховые линии 1' и 2' — результаты расчетов скоростей релаксации в кристаллах Ge и Si в приближении чистых мод согласно формулам (15) и (16) для механизмов SSS и SFF соответственно.

зависимости рассчитаны для двух наиболее актуальных случаев, когда волновые вектора фононов лежат в плоскостях граней куба или в диагональных плоскостях. Далее приводятся результаты расчета с учетом малого (для механизмов SFF $\varepsilon = 10^{-6}$ и $\varepsilon = 10^{-8}$ для SSS), но конечного затухания фононных состояний в соответствии с формулами (10)–(13) и (19). В расчетах использованы экспериментально определенные значения термодинамических модулей упругости второго c_{ik} и третьего c_{ijk} порядков, взятые из работ [2,25] (табл. 1).

На рис. 2 приведены результаты расчетов скоростей релаксации квазиперечных фононов в кубических кристаллах Ge и Si для механизмов SSS и SFF в приближении чистых мод согласно формулам (15) (кривые 1' и 2') и при точном учете векторов поляризации (кривые 1 и 2). В направлениях [001] и [101] результаты приближенных расчетов скоростей релаксации $v_{SSS}^2(\theta_1, \varphi_1)$ и $v_{SFF}^2(\theta_1, \varphi_1)$ для волновых векторов фононов в плоскостях граней куба отличаются от точных менее чем в 2.5 раза. Так, например, это отношение для вели-

Таблица 2. Значения параметров, определяющих скорости релаксации квазиперечных фононов для механизма релаксации ТТТ

Кристалл	$B_{\text{ТТТ}}^{\prime 2} \cdot 10^{24},$ $\text{cm}^4 \cdot \text{dyn}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$	$B_{\text{SFF}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1), \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$				$B_{\text{SSS}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1), \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$		
	[001]	[100]	[110]	[111]	[001]	[110]	[111]	
Ge	6.22	$3.1 \cdot 10^{-3}$	1.25	2.3	2.25	8.23	3.85	
Si	0.83	$5.2 \cdot 10^{-4}$	0.21	0.34	0.28	0.002	0.44	
Алмаз	$2.1 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$1.45 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-5}$	0	0.002	
KCl	$6.3 \cdot 10^5$	11.02	16.36	336	18.9	56.02	360	
NaCl	$2.9 \cdot 10^3$	0.1	8.8	49.8	0.042	2.46	63.7	

чин $v_{\text{SSS}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1)$ составляет 2.4 и 2.5 в направлениях типа [001] и 2.1 и 0.9 в направлениях типа [101] для кристаллов Ge и Si соответственно. Однако, как видно из сравнения кривых 1, 2 и 1', 2', использование приближения чистых мод не дает адекватного описания угловых зависимостей скоростей релаксации квазиперечных фононов в кубических кристаллах для механизмов SSS и SFF. Оно приводит к нарушению кубической симметрии для скоростей релаксации: значения $v_{\text{SSS}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1)$ и $v_{\text{SFF}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1)$ для направлений [001] и [100] при точном учете векторов поляризации совпадают (кривые 1 и 2), тогда как в приближении чистых мод они различаются почти на порядок величины. Итак, это приближение не является корректным для количественного описания анизотропии скоростей релаксации медленных квазиперечных мод в кубических кристаллах.

Анализируя результаты расчета, во-первых, следует отметить, что суммарный вклад механизмов релаксации SSS и SFF для всех рассмотренных кристаллов, за исключением алмаза, значительно превосходит вклад

механизма Ландау–Румера либо в несколько раз, либо на один–два порядка величины в зависимости от направления (рис. 2–5). Причем механизм SSS для кристаллов с существенной анизотропией упругой энергии Ge, Si и KCl оказывается более эффективным, чем механизм SFF (табл. 2). Он в значительной мере определяет полную скорость релаксации медленной квазиперечной моды в Ge, Si и KCl. Во-вторых, угловые зависимости скоростей релаксации медленной квазиперечной моды в кубических кристаллах первого типа ($\Delta C > 0$, Ge, Si и алмаз) для механизмов релаксации ТТТ и Ландау–Румера качественно различаются (рис. 2). Для кристаллов первого типа (Ge, Si и алмаза) максимальные значения скоростей релаксации $v_{\text{TLL}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1)$ достигаются в кристаллографических направлениях типа [001], а минимальные значения — в направлениях типа [101] и [111]. В противоположность этому для механизмов релаксации ТТТ минимальные значения скоростей релаксации $v_{\text{SSS}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1)$ и $v_{\text{SFF}}^{\prime 2}(\theta_1, \varphi_1)$ достигаются для направлений типа [001], а максималь-

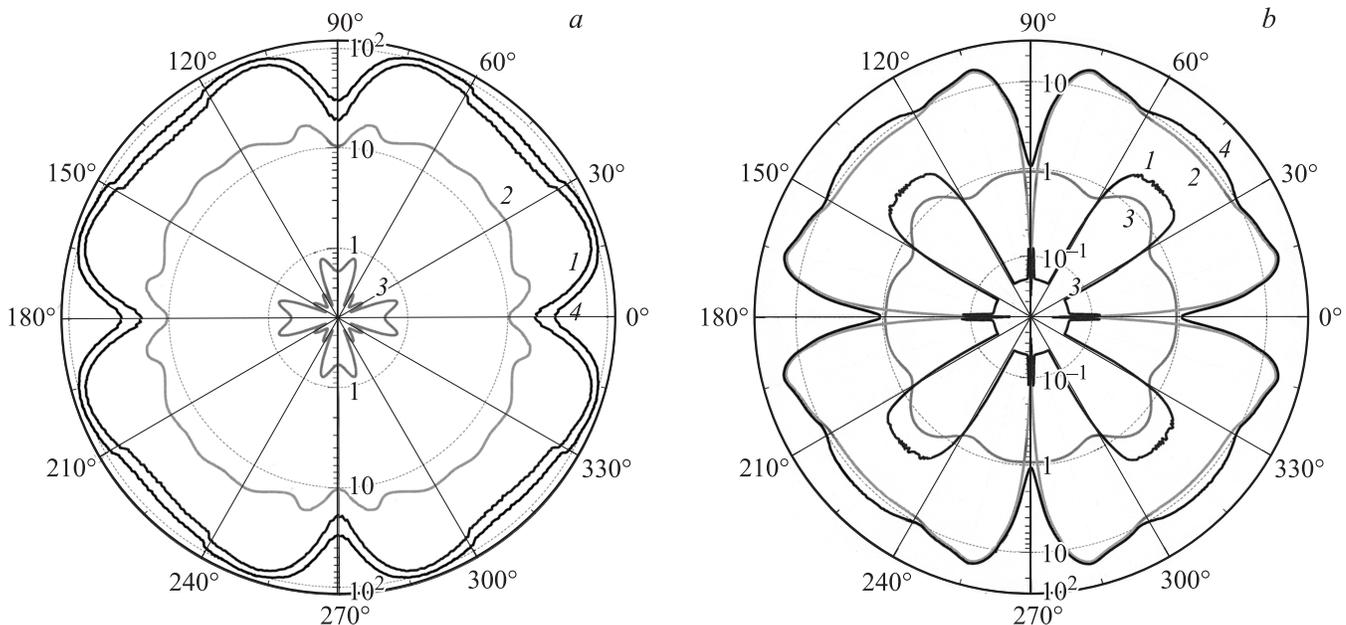


Рис. 3. Угловые зависимости скоростей релаксации медленной квазиперечной моды в кристаллах KCl (a) и NaCl (b) для волновых векторов в плоскости грани куба. Обозначения кривых 1–4 те же, что на рис. 2.

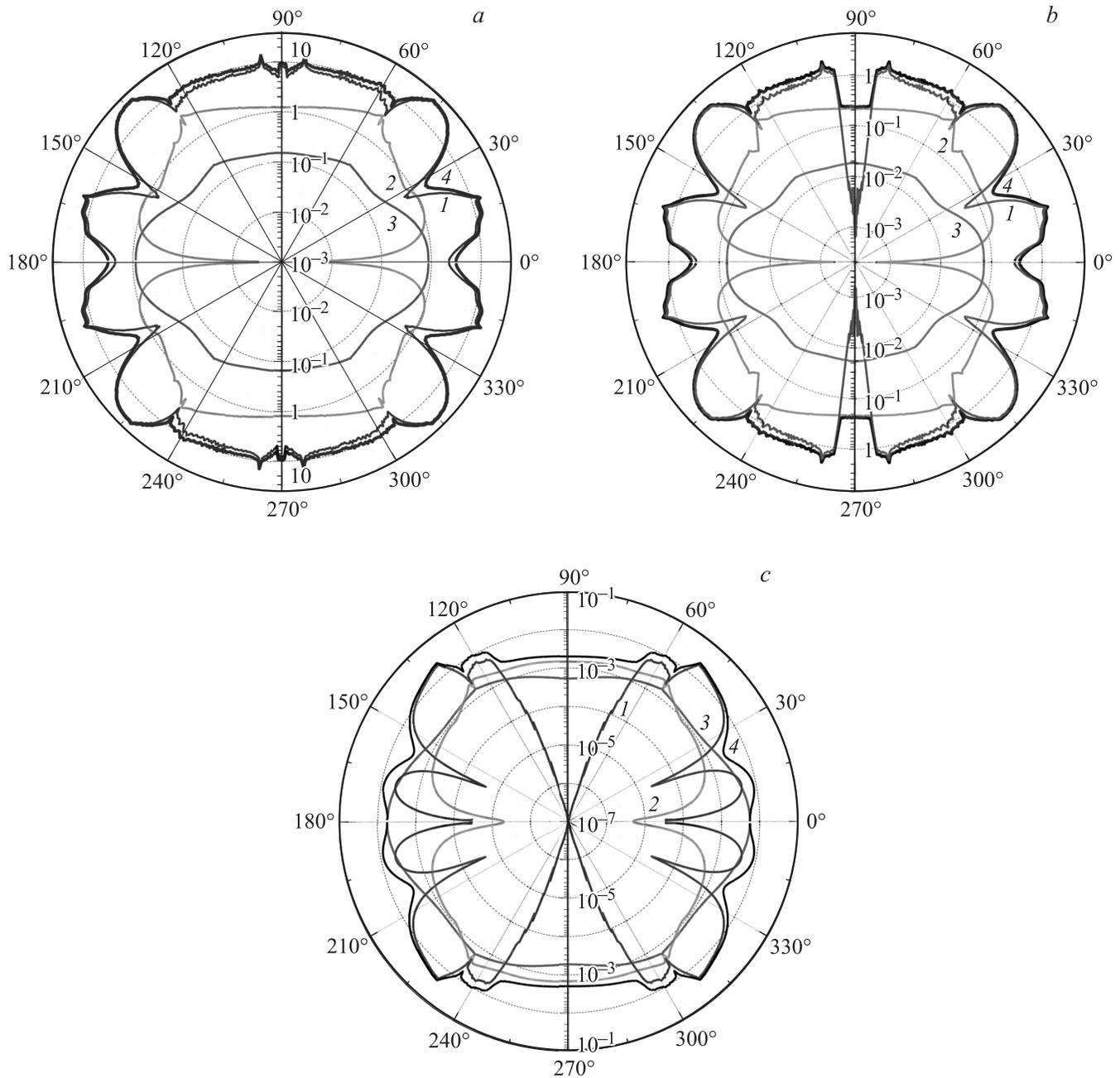


Рис. 4. Угловые зависимости скоростей релаксации медленной квазипоперечной моды в кристаллах Ge (a), Si (b) и алмаза (c) для волновых векторов в диагональной плоскости куба. Обозначение кривых 1–4 то же, что на рис. 2.

ные значения достигаются в кристаллографических направлениях типа $[101]$ и $[111]$ или в направлениях, близких к ним. Таким образом, угловые зависимости скоростей релаксации для механизмов релаксации ТТТ и Ландау–Румера в кристаллах первого типа имеют обратный характер. В кристаллах KCl для всех направлений волнового вектора доминирующий вклад в скорость релаксации медленной квазипоперечной моды вносит механизм релаксации SSS. Он в несколько раз больше вклада механизма релаксации SFF и на два порядка превосходит вклад механизма Ландау–Румера. В проти-

воположность этому для кристаллов NaCl в направлениях $[001]$ доминирует вклад механизма Ландау–Румера, тогда как в широкой области углов полная скорость релаксации определяется суммарным вкладом механизмов SFF и SSS.

Следует отметить, что в значительной степени доминирующая роль механизмов релаксации SSS и SFF по сравнению с механизмом Ландау–Румера обусловлена упругими модулями второго порядка. Отношение B_{0TTT}^2 для механизмов релаксации ТТТ к коэффициенту B_{0TLL}^2 для механизма Ландау–Румера пропорционально

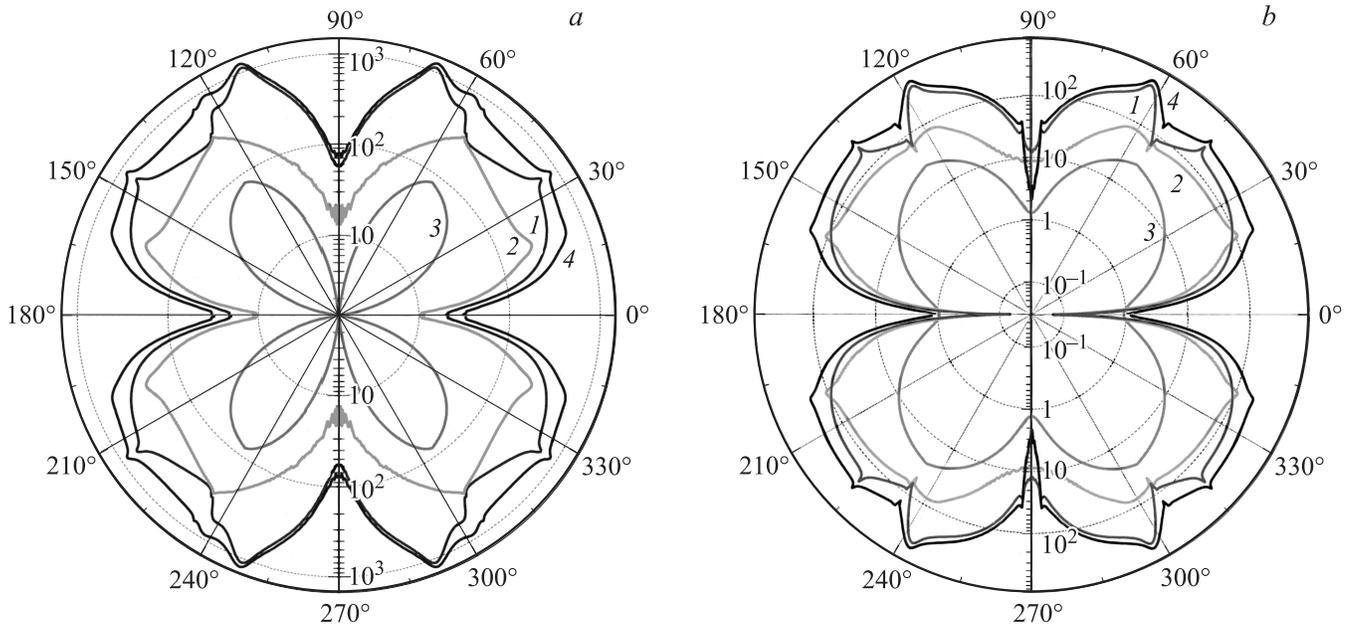


Рис. 5. Угловые зависимости скоростей релаксации медленной квазипоперечной моды в кристаллах KCl (a) и NaCl (b) для волновых векторов в диагональной плоскости куба. Обозначение кривых 1–4 то же, что на рис. 2.

отношению $(c_{11}/c_{44})^4$, которое гораздо больше единицы. Это отношение составляет 26, 32 и 16 для кристаллов первой группы Ge, Si и алмаза соответственно. Заметим, что для ионных кристаллов KCl и NaCl значения коэффициентов $B_{0TTT}^{t_2}$ превосходят $B_{0TLL}^{t_2}$ в 715 и 154 раза соответственно (табл. 2–4). Столь значительное превы-

Таблица 3. Значения параметров, определяющих скорости релаксации квазипоперечных фононов для механизма Ландау–Румера [17]

Кристалл	$B_{0TLL}^{t_2} \cdot 10^{24},$ $\text{cm}^4 \cdot \text{dyn}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$	$B_{TLL}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1), \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$		
	[001]	[100]	[110]	[111]
Ge	0.239	0.87	0.15	0.24
Si	0.026	0.071	0.019	0.023
Алмаз	$1.3 \cdot 10^{-5}$	0.0057	0.00054	0.0017
KCl	88.67	0.59	0.28	79.7
NaCl	19.32	0.93	1.3	26.2

Таблица 4. Значения параметров, определяющих полные скорости релаксации квазипоперечных фононов

Кристалл	$(\langle S_{t_1} \rangle / \langle S_{t_2} \rangle)^8$	$B_{0TTT}^{t_2} / B_{0TLL}^{t_2}$	$B^{t_2}(\theta_1, \varphi_1), \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$		
			[001]	[110]	[111]
Ge	2.8	26	3.12	9.63	6.37
Si	2.5	32	0.35	0.23	0.798
Алмаз	1.5	16	0.0058	0.00199	0.0055
KCl	5.96	715	30.51	72.66	775.7
NaCl	2.0	154	1.076	12.57	139.96

шение коэффициента $B_{0TTT}^{t_2}$ над $B_{0TLL}^{t_2}$, характеризующим скорость релаксации в механизме Ландау–Румера, для кристалла KCl связано с аномально малыми величинами модулей упругости второго порядка c_{ik} , определяющих скорости распространения поперечных фононов (табл. 1). Для кристаллов первого типа значения скоростей релаксации $v_{SSS}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1)$ и $v_{SFF}^{t_2}(\theta_1, \varphi_1)$ уменьшаются приблизительно на порядок величины при переходе от кристаллов Ge к Si и от кристаллов Si к алмазу. Это уменьшение обусловлено главным образом изменением коэффициента $B_{0TTT}^{t_2}$, который определяется упругими модулями второго порядка (табл. 2). При переходе от кристаллов Ge к Si коэффициент $B_{0TTT}^{t_2}$ уменьшается на порядок величины, а при переходе от кристаллов Si к алмазу коэффициент $B_{0TTT}^{t_2}$ уменьшается на три порядка величины. При этом два порядка величины в кристаллах алмаза компенсируются за счет больших величин упругих модулей третьего порядка, определяющих вероятность ангармонических процессов рассеяния (табл. 1).

Рассмотрим более подробно анизотропию скоростей релаксации медленной квазипоперечной моды t_2 в условиях, когда волновые векторы и векторы поляризации фононов \mathbf{q}_1 лежат в плоскости грани куба ($\varphi_1 = 0$) (рис. 2 и 3). Как видно из рисунков, при доминирующей роли ангармонических процессов рассеяния учет одного из механизмов релаксации ТТТ или Ландау–Румера не является адекватным для количественного описания анизотропии скоростей релаксации в кубических кристаллах. Так, например, в направлениях типа [001] вклады механизмов релаксации SSS, SFF и Ландау–Румера в полные скорости релаксации для кристаллов первого

типа составляют 72.1, 0.1 и 27.8% в кристаллах Ge; 80, 0.1 и 19.9% в кристаллах Si соответственно. Как следует из решения уравнения (17), для направлений типа [001] в механизме релаксации SFF в кристаллах Ge и Si могут участвовать только коллинеарные фононы ($\theta_{12} = \theta_2 = 0$). Квадрат матричного элемента (13) для этого случая тождественно обращается в нуль. Поэтому при точном выполнении закона сохранения энергии скорость релаксации медленной квазипоперечной моды $v_{\text{SFF}}^2(0, 0)$ для этих кристаллов обращается в нуль. Однако учет малого, но конечного затухания ($\varepsilon = 10^{-6}$) приводит к пренебрежимо малому, но конечному значению $v_{\text{SFF}}^2(0, 0)$ (табл. 2). Для механизма релаксации SSS в направлениях типа [001] закон сохранения энергии допускает взаимодействие как коллинеарных, так и неколлинеарных фононов (рис. 1). Вклад в скорости релаксации от взаимодействия коллинеарных фононов пренебрежимо мал. При этом для неколлинеарных фононов в кристаллах Ge интеграл $J_{\text{SSS}}^2(0, 0)$ меньше соответствующего интеграла $J_{\text{TLL}}^2(0, 0)$ для механизма Ландау–Румера в 10 раз, но коэффициент B_{OTTT}^2 превосходит B_{OTLL}^2 в 26 раз. Поэтому скорость релаксации $v_{\text{SSS}}^2(0, 0)$ превосходит вклад механизма Ландау–Румера в 2.6 раза.

В направлениях типа [101] ($\theta_1 = \pi/4$) для кристаллов Ge и Si скорость релаксации $v_{\text{TLL}}^2(\theta_1, 0)$ достигает минимальных значений, тогда как доминирующий вклад в полную скорость релаксации вносят уже механизмы релаксации ТТТ (рис. 2, *a* и *b*, кривые 1, 2 и 4). Они приводят к качественному изменению угловых зависимостей $v_2(\theta_1, 0)$ по сравнению с механизмом Ландау–Румера. При этом в направлениях типа [101] для полной скорости релаксации в кристаллах Ge реализуется максимум, для Si — минимум (рис. 2, *a*, *b*, кривые 4). В этом случае вклады механизмов релаксации SSS, SFF и Ландау–Румера в полную скорость релаксации составляют 85.5, 12.9 и 1.6% в кристаллах Ge; 0.9, 91 и 8.1% в кристаллах Si соответственно. Существенное изменение вкладов механизмов релаксации SSS и SFF при переходе от кристаллов Ge к Si обусловлено уменьшением кубической анизотропии, а именно параметра $k - 1$ (табл. 1). При этом решение уравнения (17), соответствующее рассеянию на большие углы в кристаллах Ge, для кристаллов Si исчезает, а область существования других корней мала. Поэтому значение интеграла $J_{\text{SSS}}^2(\pi/4, 0)$ для Si становится на четыре порядка меньше, чем для Ge. Несмотря на то что коэффициент B_{OTLL}^2 для кристаллов Si превосходит B_{OTTT}^2 в 32 раза, величина $v_{\text{SSS}}^2(\pi/4, 0)$ для Si оказывается меньше $v_{\text{TLL}}^2(\pi/4, 0)$ в 9 раз. Отношение значений $v_2(\pi/4, 0)$ к величинам $v_2(0, 0)$, соответствующим направлениям [001], составляют 3.1 и 0.65 для Ge и Si соответственно (табл. 4).

Параметр кубической анизотропии $k - 1$ для алмаза существенно меньше, чем для кристаллов Ge, поэтому механизмы релаксации ТТТ для него играют меньшую

роль (рис. 2, *c*, кривые 1–4). В значительной степени полная скорость релаксации $v_2(\theta_1, 0)$ определяется механизмом Ландау–Румера. Однако учет механизмов релаксации SSS и SFF приводит к дополнительным особенностям в зависимости $v_2(\theta_1, 0)$ от угла θ_1 . Для направлений [001] доминирующий вклад в скорость релаксации вносит механизм Ландау–Румера. Из решений уравнения (17) для этих направлений в механизмах релаксации SSS и SFF могут участвовать только коллинеарные фононы ($\theta_{12} = 0$). Поэтому скорости релаксации $v_{\text{SSS}}^2(0, 0)$ и $v_{\text{SFF}}^2(0, 0)$ при точном выполнении закона сохранения энергии обращаются в нуль. Однако учет малого затухания приводит к пренебрежимо малым, но конечным значениям этих величин за счет малоуглового рассеяния. В результате для направлений [001] вклад механизма Ландау–Румера в полную скорость релаксации превышает суммарный вклад механизмов релаксации SSS и SFF в 150 раз. Полная скорость релаксации в этом направлении $v_2(0, 0)$ имеет локальный минимум. Связано это с тем, что скорость релаксации для механизма SSS достигает максимальных значений в направлениях, близких к [001] ($\theta_1 \cong \pi/2 \pm 0.21$). Эти максимумы обусловлены взаимодействием неколлинеарных фононов. Несмотря на то что их величины меньше значений $v_{\text{TLL}}^2(0, 0)$ в 2.4 раза, они приводят к появлению максимумов полной скорости релаксации $v_2(\theta_1, 0)$ при углах $\theta_1 \cong \pi/2 \pm 0.17$. Их величины в 1.2 раза больше значения $v_2(0, 0)$. Скорость релаксации для механизма SFF достигает максимальных значений в направлениях типа [101] и обуславливает появление локального максимума на зависимости полной скорости релаксации $v_2(\theta_1, 0)$. Значение $v_2(\pi/4, 0)$ оказывается меньше величины $v_2(0, 0)$, соответствующей направлению [001], в 2.9 раза. Функция $v_2(\theta_1, 0)$ для алмаза достигает равных по величине минимальных значений при углах $\theta_1 \cong \pi/6$ и $\theta_1 \cong \pi/3$, которые меньше значений $v_2(0, 0)$ в 3.6 раза.

Для кубических кристаллов с отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка KCl и NaCl соотношения вкладов механизмов релаксации SSS и SFF в скорости релаксации фононов значительно различаются (рис. 3, *a*, *b*, кривые 1–4). Кристаллы KCl являются наиболее анизотропными из второй группы кристаллов. Для них скорости релаксации $v_{\text{SSS}}^2(0, 0)$ и $v_{\text{SFF}}^2(0, 0)$ обусловлены взаимодействием неколлинеарных фононов, а доминирующий вклад в полную скорость релаксации $v_2(\theta_1, 0)$ вносит механизм SSS. Преобладающая роль механизма релаксации SSS по сравнению SFF обусловлена тем, что в знаменатель интеграла $J_{\text{SSS}}^2(\theta_1, \varphi_1)$ входит фазовая скорость медленной моды $S_{t_2}(\theta_2, \varphi_2)$ в восьмой степени, тогда как в $J_{\text{SFF}}^2(\theta_1, \varphi_1)$ — фазовая скорость быстрой моды $S_{t_1}(\theta_2, \varphi_2)$ тоже в восьмой степени (см. формулу (11)), причем $S_{t_2}(\theta_2, \varphi_2) \leq S_{t_1}(\theta_2, \varphi_2)$. В табл. 4 приведены отношения средних скоростей быстрой и медленной моды в восьмой степени для всех исследованных кристаллов. Это отношение для KCl равно шести. Поэтому неудивительно, что вклады механизмов

релаксации SSS, SFF и Ландау–Румера в полные скорости релаксации составляют 62, 36 и 2% для направлений типа [001] и 77, 22.5 и 0.5% для направлений типа [101]. Таким образом, для KCl механизм релаксации Ландау–Румера вносит пренебрежимо малый вклад в скорость релаксации медленной квазипоперечной моды. Полная скорость релаксации $v_{t_2}(\theta_1, 0)$ в KCl достигает максимальных значений для углов $\theta_1 \cong n\pi/2 \pm 0.35$ ($n = 0, 1, 2$ и т.д.), а минимальных значений — для направлений типа [001], в направлениях [101] ($\theta_1 = \pi/4$) реализуется локальный минимум (рис. 3, *a*, кривые 4). В противоположность этому для кристаллов NaCl в направлениях [001] доминирует механизм Ландау–Румера, а в широкой области углов $0.12 < \theta_1 < 1.45$ полная скорость релаксации определяется механизмом SFF (рис. 3, *b*, кривые 2–4). Для направлений [001] в механизмах релаксации SSS и SFF могут участвовать только коллинеарные фононы ($\theta_{12} = 0$). Поэтому при точном выполнении закона сохранения энергии значения скоростей релаксации $v_{SSS}^t(0, 0)$ и $v_{SFF}^t(0, 0)$ в кристаллах NaCl обращаются в нуль. Однако при учете малого затухания их величины становятся отличными от нуля за счет малоуглового рассеяния. При этом суммарный вклад механизмов релаксации SSS и SFF в полную скорость релаксации оказывается на порядок меньше вклада механизма Ландау–Румера (табл. 3). Скорость релаксации $v_{SSS}^t(\theta_1, 0)$ достигает максимальных значений в направлениях типа [101] ($\theta_1 = \pi/4$). Ее значения превосходят соответствующие величины для механизма Ландау–Румера в 1.8 раза. В кристаллах NaCl полная скорость релаксации $v_{t_2}(\theta_1, 0)$ достигает максимальных значений для углов $\theta_1 \cong n\pi/2 \pm 0.25$ ($n = 0, 1, 2$ и т.д.), а в направлениях [101] ($\theta = \pi/4$) реализуется локальный максимум (рис. 3, *b*, кривые 4). Минимальные значения полной скорости релаксации $v_{t_2}(\theta_1, 0)$ в кристаллах KCl и NaCl достигают в направлениях типа [001]. Следует отметить, что анизотропия полной скорости релаксации $v_{t_2}(\theta_1, 0)$ в значительной степени отличается от анизотропии скорости релаксации $v_{TLL}^t(\theta_1, 0)$ для механизма Ландау–Румера. Так, например, отношение величин $v_{t_2}(\pi/4, 0)$ и $v_{t_2}(0, 0)$ составляет 2.4 и 11.7 для KCl и NaCl соответственно. Для механизма Ландау–Румера отношение $v_{TLL}^t(\pi/4, 0)$ и $v_{TLL}^t(0, 0)$ составляет 0.5 и 1.4 для KCl и NaCl соответственно.

Более сложный вид имеют угловые зависимости скоростей релаксации $v_{SSS}^t(\theta_1, \pi/4)$, $v_{SFF}^t(\theta_1, \pi/4)$ и $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ в кристаллах первого и второго типа для волновых векторов q_1 , лежащих в диагональной плоскости ($\varphi_1 = \pi/4$) (рис. 4, 5). Связано это как с пересечением спектров квазипоперечных мод, так и с поведением векторов поляризации поперечных мод. Как уже отмечалось, для кристаллов первого типа медленная мода t_2 в области углов $0 < \theta_1 < \theta_{111}$ и $\pi - \theta_{111} < \theta_1 < \pi$ является квазипоперечной с вектором поляризации $e_{q_1}^t$, лежащим в диагональной плоскости. А в области углов $\theta_{111} < \theta_1 < \pi - \theta_{111}$ она является чистой модой с вектором поляризации, перпендикуляр-

ным диагональной плоскости. Для кристаллов второго типа приведенные выше области углов θ_1 меняются местами (см. подробнее [14]). В связи с отмеченными обстоятельствами на угловых зависимостях скоростей релаксации $v_{SSS}^t(\theta_1, \pi/4)$, $v_{SFF}^t(\theta_1, \pi/4)$ и $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ в направлениях типа [111] появляются особенности: в кристаллах первого типа (Ge, Si и алмазе), а также для кристалла второго типа NaCl имеют место резкие локальные минимумы, тогда как в кристаллах KCl для механизма SFF реализуются абсолютный максимум, а для механизма релаксации SSS — локальный минимум.

Как видно из рис. 4, *a, b*, угловые зависимости скоростей релаксации $v_{SSS}^t(\theta_1, \pi/4)$, $v_{SFF}^t(\theta_1, \pi/4)$ и $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ для кристаллов Ge и Si качественно подобны. Для них во всей области углов θ_1 доминирует механизм релаксации SSS, и значения полных скоростей релаксации $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ и $v_{SSS}^t(\theta_1, \pi/4)$ близки по величине (рис. 4, *a, b* кривые 1 и 4). Минимальные величины скоростей релаксации $v_{SSS}^t(\theta_1, \pi/4)$ и $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ достигаются для направлений типа [001], [111], в направлениях близких к [011], и при $\theta_1 \cong \pi/6$. Причем абсолютные минимумы функции $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ достигаются при углах $\theta_1 \cong \pi/6$, значения которых оказываются меньше величин $v_{t_2}(0, \pi/4)$ в 1.7 и 1.5 раза для Ge и Si соответственно. В направлениях типа [001] вклад механизма Ландау–Румера, для которого величина $v_{TLL}^t(\theta_1, \pi/4)$ в этом направлении имеет максимум, составляет 27.8 и 20% соответственно. В направлениях типа [111] вклад механизма Ландау–Румера существенно меньше, а вклады механизмов релаксации SSS и SFF приблизительно равны (рис. 4, *a, b* кривые 1–3). Максимальные значения полной скорости релаксации $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ для Ge и Si достигаются при значениях углов, близких к $\theta_1 = \pi/4$, и обусловлены механизмом релаксации SSS. Эти величины превосходят значения $v_{t_2}(0, \pi/4)$ в 8.8 и 9.8 для Ge и Si соответственно (рис. 4, *a, b*).

Для скоростей релаксации в кристаллах алмаза случаи волновых векторов, лежащих в диагональной плоскости ($\varphi_1 = \pi/4$) (рис. 4, *c*, кривые 1–4) и в плоскости грани куба ($\varphi_1 = 0$), существенно различаются. Доминирующий вклад в полную скорость релаксации в направлениях типа [001] вносит механизм Ландау–Румера, который для этого направления имеет максимальное значение. Однако полная скорость релаксации в этом направлении имеет локальный минимум. Абсолютный максимум полной скорости релаксации $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ реализуется при углах $\theta_1 \cong 0.96$ и обусловлен механизмом релаксации SSS. Его значение превосходит величину $v_{t_2}(0, \pi/4)$ приблизительно в 4 раза. При углах $\pi/2 < \theta_1 < \pi/2.4$ вклад механизма релаксации SSS обращается в нуль, а доминирующую роль играет механизм SFF. Скорость релаксации для механизма SFF достигает максимальных значений в направлениях, близких к [111]. В направлениях типа [110] ($\theta_1 \cong \pi/2$) для полной скорости релаксации реализуется минимум, а вклад механизма SFF превосходит вклад механизма Ландау–Румера в 2.5 раза.

Функция $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ для алмаза имеет локальный максимум при значениях угла $\theta_1 \cong \pi/6$ и два локальных минимума при углах $\theta_1 = \theta_{111}$ и $\theta_1 \cong 0.42$.

Для волновых векторов, лежащих в диагональной плоскости ($\varphi_1 = \pi/4$), анизотропия скоростей релаксации в кристаллах KCl и NaCl существенно выше, чем для волновых векторов в плоскости грани куба (рис. 5, *a, b*, кривые 4). Полная скорость релаксации для кристаллов KCl и NaCl достигает минимальных значений в направлениях типа [001] ($\theta_1 = 0$). Значения $v_{t_2}(0, \pi/4)$ в кристаллах KCl определяются суммарным вкладом механизмов релаксации SSS и SFF, тогда как в кристаллах NaCl — механизмом Ландау–Румера. Абсолютные максимумы полной скорости релаксации $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ обусловлены механизмом релаксации SSS и реализуются при углах $\theta_1 \cong 1.19$ и $\theta_1 \cong 1.1$ для кристаллов KCl и NaCl соответственно. Их величины превосходят минимальные значения $v_{t_2}(0, \pi/4)$ в 41 и 490 раза для KCl и NaCl соответственно. Кроме этого, функция $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ в кристаллах KCl имеет локальные максимумы при углах $\theta_1 \cong 1.03$, $\theta_1 = \theta_{111}$ и $\theta_1 \cong 0.6$, значения которых превосходят $v_{t_2}(0, 0)$ в 29, 25 и 28 раза соответственно. Первый из них обусловлен механизмом релаксации SFF, а второй — механизмом релаксации SSS. В кристаллах NaCl в отличие от KCl для направлений типа [111] полная скорость релаксации $v_{t_2}(\theta_1, \pi/4)$, а также величины $v_{SSS}^{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ и $v_{SFF}^{t_2}(\theta_1, \pi/4)$ имеют резкие локальные минимумы, как и в кристаллах первой группы (рис. 4, *b*, кривые 1, 2 и 4). Величина $v_{t_2}(\theta_{111}, \pi/4)$ превосходит минимальные значения $v_{t_2}(0, 0)$ в направлениях типа [001] в 109 раз. Вклады механизмов релаксации SSS, SFF и Ландау–Румера в полные скорости релаксации для направлений типа [111] составляют 46.4, 43.3 и 10.3% для кристаллов KCl и 45.5, 35.6 и 18.9% для кристаллов NaCl.

Итак, из всех рассмотренных кристаллов полные скорости релаксации достигают максимальных значений в кристаллах KCl: коэффициент $B^{t_2}(\theta_1, \varphi_1) = 1240 \text{ s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$ при $\theta_1 \cong 1.19$. Минимальные значения они имеют в кристаллах алмаза: коэффициент $B^{t_2}(\theta_1, \pi/4) = 0.0016 \text{ s}^{-1} \cdot \text{K}^{-5}$ при θ_1 , равных $\pi/6$ и $\pi/3$. Максимальная анизотропия скоростей релаксации имеет место в кристаллах NaCl: отношение минимальных значений к максимальным достигает почти 500 раз.

4. Заключение

Исследованы механизмы релаксации и квазипоперечных фононов в ангармонических процессах рассеяния. В длинноволновом приближении рассмотрены механизмы релаксации SSS, SFF и Ландау–Румера в кубических кристаллах с положительной (Ge, Si и алмаз) и отрицательной (KCl, NaCl) анизотропией модулей упругости второго порядка. В модели анизотропно-го континуума проанализированы угловые зависимости скоростей релаксации медленной квазипоперечной моды

и найдены полные скорости релаксации. Показано, что использование приближения чистых мод не является адекватным для количественного описания анизотропии скоростей релаксации квазипоперечных фононов в кубических кристаллах. Основные результаты работы могут быть сформулированы следующим образом.

1) Рассчитаны скорости релаксации медленных длинноволновых квазипоперечных фононов в кубических кристаллах для механизмов ТТТ. Показано, что для кристаллов с существенной анизотропией упругой энергии (Ge, Si, KCl и NaCl) суммарный вклад механизмов релаксации ТТТ превосходит вклад механизма Ландау–Румера в полную скорость релаксации либо в несколько раз, либо на один-два порядка величины. Доминирующая роль механизмов релаксации ТТТ по сравнению с механизмом Ландау–Румера обусловлена упругими модулями второго порядка. В кристаллах алмаза с меньшей анизотропией упругой энергии значительную роль в релаксации фононов играет механизм Ландау–Румера.

2) Найдены полные скорости релаксации медленных квазипоперечных фононов. Показано, что при доминирующей роли ангармонических процессов рассеяния учет одного из механизмов релаксации (Ландау–Румера, механизмов SSS или SFF) является недостаточным для описания анизотропии полных скоростей релаксации фононов в кубических кристаллах.

3) В кристаллах с существенной анизотропией упругой энергии Ge, Si и KCl вклад механизма SSS либо в несколько раз, либо на порядок величин превосходит вклад механизма SFF. В кристаллах алмаза и NaCl оба вклада имеют одинаковый порядок величины. Преобладание вклада SSS над механизмом SFF главным образом связано с анизотропией упругой энергии.

4) Показано, что механизмы релаксации SSS и SFF обусловлены кубической анизотропией кристаллов, приводящей к взаимодействию неколлинеарных фононов.

5) Установлено, что пересечение спектров квазипоперечных мод и изменение направлений векторов поляризации моды ST в направлениях [111] приводят к резким особенностям в скоростях релаксации медленных квазипоперечных фононов для механизмов SSS и SFF в окрестности этих направлений.

Авторы выражают благодарность А.П. Танкееву за обсуждение результатов работы и критические замечания.

Список литературы

- [1] В.Л. Гуревич. Кинетика фононных систем. Наука, М. (1980). 400 с.
- [2] B. Truel, C. Elbaum, B.B. Chick. Ultrasonic methods in solid state physics. Academic press, N.Y.–London (1969). 307 p.
- [3] Дж. Такер, В. Рэмpton. Гиперзвук в физике твердого тела. Мир, М. (1975). 453 с.
- [4] H.J. Maris. Phys. Acoustics 7, 280 (1971).
- [5] А.П. Жернов, А.В. Инюшкин. УФН 171, 827 (2001); УФН 172, 573 (2002).

- [6] L. Landau, J. Rumer. *Sov. Phys.* **11**, 18 (1937).
- [7] Б.М. Могилевский, А.Ф. Чудновский. Теплопроводность полупроводников. Наука, М. (1972). 536 с.
- [8] Р. Берман. Теплопроводность твердых тел. Мир, М. (1979). 288 с.
- [9] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. *ЖЭТФ* **120**, 649 (2001); **121**, 558 (2002).
- [10] R.A.H. Hamilton, J.E. Parrot. *Phys. Rev.* **178**, 1284 (1969).
- [11] P.J. King. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **4**, 1306 (1971).
- [12] I.C. Simpson. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8**, 399 (1975).
- [13] I.C. Simpson. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8**, 1783 (1975).
- [14] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. *ФТТ* **49**, 422 (2007).
- [15] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. 2nd ed. John Wiley and Sons, Inc., N.Y. (1956). 523 p.
- [16] I.G. Kuleyev, I.I. Kuleyev, I.Yu. Arapova. *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 406 216 (2007).
- [17] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, И.Ю. Арапова. *ФТТ* **49**, 1272 (2007).
- [18] C. Herring. *Phys. Rev.* **95**, 954 (1954).
- [19] S. Simons. *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **53**, 702 (1957).
- [20] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. *ФТТ* **47**, 300 (2005).
- [21] Ю.В. Илизавский, Д. Чиплис. *ФТТ* **14**, 2412 (1972).
- [22] Ю.В. Илизавский, В.М. Стернин. *ФТТ* **27**, 385 (1985).
- [23] В.В. Леманов, Г.А. Смоленский. *УФН* **108**, 465 (1972).
- [24] А.И. Ахиезер. *ЖЭТФ* **8**, 1318 (1938).
- [25] И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Наук. думка, Киев (1982). 355 с.