

# Ангармонические процессы рассеяния и релаксация квазипоперечных мод в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка

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

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,  
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 28 августа 2006 г.)

Рассмотрена релаксация длинноволновых квазипоперечных мод в ангармонических процессах рассеяния. В модели анизотропного континуума проанализированы зависимости релаксации в кубических кристаллах от направления волнового вектора квазипоперечных фононов для механизма Ландау–Румера как в случае квазиизотропного приближения, так и при точном учете кубической анизотропии. Установлено, что квазиизотропное приближение не является адекватным для количественного описания особенностей анизотропии скоростей релаксации квазипоперечных фононов. Показано, что в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка качественно различаются не только спектр и векторы поляризации фононов, но и угловые зависимости скоростей релаксации квазипоперечных колебательных мод.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 05-02-16912, программы Президиума РАН № 12, ведущей научной школы № НШ 5869.2006.2, а также „Фонда содействия отечественной науке“.

PACS: 62.20.Dc, 62.80.+f, 63.20.-e, 63.20.Kr, 63.20.Dj

Проблема корректного расчета скоростей релаксации фононов различных поляризаций в ангармонических процессах рассеяния является актуальной для исследования фононного транспорта, поглощения ультразвука и термоэдс электрон-фононного увлечения в полупроводниковых и диэлектрических кристаллах. Основная трудность решения задач связана с одновременным учетом анизотропии как в гармонической, так и в ангармонической энергии кристаллов. Решение их требует точного учета влияния кубической анизотропии на спектр и поляризацию фононов, входящих в вероятность трехфононных процессов рассеяния и в закон сохранения энергии. Удобным приближением для решения этих задач является модель анизотропного континуума. В работах [1] получено выражение для упругой энергии, обусловленной ангармонизмом колебаний решетки, для кристаллов кубической симметрии через экспериментально определенные упругие модули второго и третьего порядка и рассчитаны скорости релаксации фононов для ряда ангармонических процессов релаксации. В работе [2] рассмотрено поглощение поперечного ультразвука в кубических кристаллах Ge, Si и алмаза. Показано, что учет кубической анизотропии в матричном элементе, описывающем трехфононные процессы рассеяния, приводит к качественному различию между зависимостями скоростей релаксации от волнового вектора поперечных фононов и классической линейной зависимостью Ландау–Румера [3]. Однако анализ, проведенный в работах [1,2], выполнен в изотропном приближении для спектра и поляризаций фононов: в законе сохранения энергии не учитывалось влияние кубической анизотропии на спектр фононов. При этом колебательные моды

считались чистыми модами (чисто продольными или чисто поперечными). Известно, что в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания, и только в симметричных направлениях, таких как [100], 110 и [111], распространяются чистые моды [4–6]. В работе [7] проведен детальный анализ спектра и поляризаций колебательных ветвей для кубических кристаллов. Показано, что все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной  $\Delta C > 0$  (параметры  $\Delta C = c_{12} + 2c_{44} - c_{11}$ ,  $c_{ij}$  — упругие модули второго порядка) и отрицательной  $\Delta C < 0$  анизотропией упругих модулей второго порядка. Как правило, вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах обоих типов мал, и им можно пренебречь. Напротив, 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. Итак, принятые в [1,2] приближения могут приводить к большой погрешности при расчете скоростей релаксации фононов различных поляризаций. Поэтому в настоящей работе влияние кубической анизотропии на спектр и поляризацию фононов в модели анизотропного континуума будет учтено строго. При этом мы рассмотрим два типа кубических кристаллов с положительной (Ge, Se, алмаза и InSb) и отрицательной (KCl, NaCl и GaAs) анизотропией упругих модулей второго порядка (табл. 1 в работе [7]). Проанализируем угловые зависимости скоростей релаксации квазипоперечных колебательных ветвей и уточним результаты, полученные в [1] для скоростей релаксации длинноволновых поперечных фононов.

# 1. Частота релаксации поперечных фононов в механизме Ландау—Румера для кубических кристаллов

Согласно общепринятым представлениям [8–10], основным механизмом релаксации поперечных фононов в нормальных трехфононных процессах рассеяния является механизм Ландау—Румера [3], в котором слияние поперечного и продольного фононов порождает продольный фонон ( $T + L \rightarrow L$ ). Этот механизм релаксации считается основным для поперечных тепловых фононов и при расчетах решеточной теплопроводности [11–15].

Анализ скорости релаксации поперечных фононов  $v_{phN}^{TLL}(z_1 T)$  в кристаллах Ge, Si и алмаза, проведенный в работе [1], показал, что ее зависимость от волнового вектора для тепловых и высокочастотных фононов имеет немонотонный характер с двумя максимумами. В этом расчете спектр продольных фононов, входящих в закон сохранения энергии в трехфононных процессах рассеяния, учитывался в изотропном приближении, и при усреднении по волновым векторам продольных фононов не учитывалась угловая зависимость фазовых скоростей (рис. 1 в работе [7]). Поэтому оценки анизотропии скорости релаксации  $v_{phN}^{TLL}(z_1, T)$  и соответственно анизотропии поглощения ультразвука в кубических кристаллах, приведенных в работах [1,2], нуждаются в уточнении. Что касается векторов поляризации фононов, то для квазипродольных колебаний ограничимся рассмотрением чистых мод. Как показано в работе [7], погрешность, вносимая этим приближением, для продольных фононов мала и составляет менее 2% для кристаллов типа Ge, Si, алмаза и InSb и 3% для кристаллов типа KCl. Для квазипоперечных фононов, распространяющихся в направлениях, отличающихся от симметричных, ситуация менее благоприятная. Максимальный вклад продольной компоненты в поперечно-продольные колебания, согласно работе [7], составляет 16.5% для Ge, 10% для Si, 8% для алмаза, а в кристаллах KCl достигает 27%. Поэтому далее при расчете скоростей релаксации квазипоперечных мод в произвольном направлении учтем вклад продольной компоненты в поперечно-продольные колебания.

Исходное выражение для скорости релаксации фононов с поляризацией  $\lambda_1$  имеет вид [1]

$$v_{phN}(q_1, \lambda_1) = \frac{\pi \hbar^4}{(2\rho k_B T)^3} \frac{1}{V} \sum_{\substack{q_2 q_3 \\ \lambda_2 \lambda_3}} \frac{\text{sh}\left(\frac{z_1}{2}\right) \delta_{q_1+q_2+q_3, 0}}{z_1 z_2 z_3 \text{sh}\left(\frac{z_2}{2}\right) \text{sh}\left(\frac{z_3}{2}\right)} \times |V_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_3}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}|^2 \{ 2\delta(\omega_{q_1 \lambda_1} + \omega_{q_2 \lambda_2} - \omega_{q_3 \lambda_3}) + \delta(\omega_{q_1 \lambda_1} - \omega_{q_2 \lambda_2} - \omega_{q_3 \lambda_3}) \}. \quad (1)$$

Здесь  $\rho$  — плотность,  $V$  — нормировочный объем,  $T$  — температура,  $\omega_{q\lambda}$  — частота фонона с волновым вектором  $q$  и поляризацией волны  $\lambda$ ,  $z_n = \hbar \omega_{q_n}^n / k_B T$ .

Поскольку спектр и векторы поляризации колебательных мод для произвольного направления волнового вектора определены в системе координат, связанной с ребрами куба, далее будем пользоваться этой системой координат. Спектр фононов с поляризацией  $\lambda$  и волновым вектором гораздо меньше дебаевского волнового вектора  $q_d$  в модели анизотропного континуума имеет вид

$$\omega_q^\lambda = S_\lambda(\theta, \varphi) q. \quad (2)$$

Анизотропия спектра определяется анизотропией фазовой скорости фононов  $S_\lambda(\theta, \varphi)$ , зависящей от угловых переменных  $\theta$  и  $\varphi$  вектора  $\mathbf{q}$  [7],

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

$$z_L = 2r \cos \frac{Q}{3}, \quad z_{T_1, T_2} = 2r \cos \left( \frac{Q}{3} \pm \frac{2\pi}{3} \right),$$

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

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

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 вектор фонона. Параметр  $k-1$  характеризует упругую анизотропию кубических кристаллов.

В законе сохранения энергии учтем анизотропию спектра поперечных фононов точно, а анизотропию продольных фононов, по которым проводится усреднение, — по теории возмущений. Для этого представим скорость продольных фононов в виде

$$S_2^L(\theta_2, \varphi_2) = S_L(1 + \Delta_2^L(\theta_2, \varphi_2)),$$

$$S_L = \langle S_L(\theta, \varphi) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega S_L(\theta, \varphi). \quad (4)$$

Поскольку величина  $|\Delta_L(\theta, \varphi)| \leq 0.1$  (ее максимальные значения для кристаллов Ge, Si и алмаза составляют 0.08, 0.07 и 0.04 соответственно), то можно ограничиться учетом членов, линейных по этой поправке, а величинами, квадратичными по этой поправке, пренебречь. Погрешность этого приближения составляет менее 1%. Для определения скорости  $S_L(\theta_3, \varphi_3)$  из закона сохранения импульса выразим угловые переменные  $\theta_3$  и  $\varphi_3$  вектора  $\mathbf{q}_3$  через угловые переменные  $\theta_1, \varphi_1$  и  $\theta_2, \varphi_2$  волновых векторов  $\mathbf{q}_1$  и  $\mathbf{q}_2$  и определим соответствующие

кубические гармоники

$$\begin{aligned}\xi_3 &= (1 - \psi_3)\psi_3 + \psi_4^2, \quad \eta_3 = \psi_3\psi_4^2, \\ \psi_3 &= (\cos \Theta_3)^2 \\ &= (\cos \Theta_2 + y \cos \Theta_1)^2 / (1 + y^2 + 2y \cos \theta_{12}), \quad y = q_1/q_2, \\ \psi_4 &= (\sin \Theta_3)^2 \sin \varphi_3 \cos \varphi_3 \\ &= \frac{(\sin \Theta_2 \sin \varphi_2 + y \sin \Theta_1 \sin \varphi_1)}{(1 + y^2 + 2y \cos \theta_{12})} \\ &\times (\sin \Theta_2 \cos \varphi_2 + y \sin \Theta_1 \cos \varphi_1), \\ \cos \theta_{12} &= (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) \\ &= \sin \theta_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \sin \theta_2 + \cos \theta_1 \cos \theta_2.\end{aligned}\quad (5)$$

Проанализируем угловые зависимости скоростей релаксации фононов для двух наиболее актуальных случаев, а именно: 1) для волновых векторов  $\mathbf{q}_1$  в плоскости грани куба ( $\varphi_1 = 0$ ); 2) для волновых векторов  $\mathbf{q}_1$  в диагональной плоскости ( $\varphi_1 = \pi/4$ ). После несложных вычислений для механизма Ландау–Румера получим

$$\begin{aligned}v^{TLL} &= B^{TLL} z_1 T^5, \\ B^{TLL}(z_1, T, \theta_1, \varphi_1) &= B_0 J(z_1, T, \theta_1, \varphi_1), \\ B_0 &= \frac{\pi^3 k_B^5}{15 \hbar^4 \rho^2 s_t(\theta_1, \varphi_1) \langle s_L \rangle^8}, \\ J(z_1, T) &= \frac{15}{16\pi^4} \left\{ \frac{\text{sh}(0.5z_1)}{(0.5z_1)} \right\} \int_{z_{\min}(\theta_0, \varphi_0)}^{z_d^L} dz_2 F(z_1, z_2) \\ &\times \int_{-1}^1 d(\cos \theta_2) \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta(\cos \theta_{12} - S^{**}) \frac{I(\theta_2, \varphi_2)}{(1 + \Delta_2)^8}.\end{aligned}\quad (6)$$

Здесь

$$\begin{aligned}F(z_1, z_2) &= z_2^4 \left(1 + \frac{z_1}{2z_2}\right)^2 \\ &\times \left[ \left(1 + \frac{z_1}{z_2}\right)^2 \text{sh}\left(\frac{z_2}{2}\right) \text{sh}\left(\frac{z_1 + z_2}{2}\right) \right]^{-1}, \quad z_1 = \frac{\hbar \omega'_{q_1}}{k_B T}, \\ S^{**} &= S^* \frac{(1 + \Delta_2)}{(1 + \Delta_3)^2} + \left[ \left(\frac{1 + \Delta_2}{1 + \Delta_3}\right)^2 - 1 \right] \frac{1}{2y} \\ &- 0.5y \left[ 1 - \left(\frac{S^*}{1 + \Delta_3}\right)^2 \right], \quad z_{\min} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{S^*} - 1 \right) z_1,\end{aligned}\quad (7)$$

$S^* = S_t(\theta_1, \varphi_1)/S_L$ ,  $z_{dL} = \frac{\hbar \omega_{dL}}{k_B T}$ ,  $\omega_{dL}$  — дебаевская частота продольных фононов.

В линейном приближении по кубической анизотропии второго порядка имеем

$$\begin{aligned}S^{**} &= S^*(1 + \Delta_2 - 2\Delta_3) + (\Delta_2 - \Delta_3)/y \\ &- 0.5y [1 - (S^*)^2(1 - 2\Delta_3)].\end{aligned}\quad (7a)$$

Выражение для матричного элемента, описывающего трехфононные процессы рассеяния квазипоперечных фононов, имеет вид

$$\begin{aligned}I(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) &= \left(2 \frac{q_1 q_2^3}{q_3}\right)^{-2} |V_{q_1 q_2 q_3}^{TLL}|^2 \\ &= \left\{ A_{\text{cub}}(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) \Phi_1 \Phi_2 + (2\tilde{c}_{155} + \Delta C) N_C + 2\tilde{c}_{155} N_{155} \right. \\ &\quad + 0.5\tilde{c}_{111} N_{111} + \tilde{c}_{112} N_{112} + (\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) [0.5\tilde{c}_{112} \Delta N_{112} \\ &\quad + \tilde{c}_{123}(0.5 + y\Phi_2) + (\tilde{c}_{155} + 0.5\Delta C)y\Delta N_{155} \\ &\quad + (1.5c_{44} + 2c_{456})y\Phi_1 \cos(\theta_{12}) \\ &\quad \left. + (0.5c_{12} + c_{144})(\Phi_1 + y\Phi_4) \right\}^2,\end{aligned}\quad (8)$$

где

$$\begin{aligned}A_{\text{cub}} &= c_{12} + 3c_{44} + 2c_{144} + 4c_{456}, \\ y &= \frac{q_1}{q_2} = \frac{z_1}{z_2} \frac{(1 + \Delta_2)}{S^*(\theta_1, \varphi_1)}, \\ N_C &= \sum_i n_{1i} n_{2i} (n_{2i} + y n_{1i}) \\ &\times [(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2)(n_{2i} + 0.5y n_{1i}) + 0.5\Phi_1 e_{1i}], \\ N_{155} &= \sum_i e_{1i} n_{2i} (n_{2i} + y n_{1i}) [n_{2i} \Phi_2 + n_{1i} \Phi_3], \\ n_{1i} &= q_{1i}/q_1, \quad n_{2i} = q_{2i}/q_2, \\ N_{111} &= \sum_i e_{1i} n_{1i} n_{2i}^2 [n_{2i} + y n_{1i}]^2, \\ N_{112} &= \sum_i e_{1i} n_{1i} [n_{2i}^2 (\Phi_1 + 0.5y^2) + y n_{1i} n_{2i} + 0.5y^2 n_{2i}^2], \\ \Delta N_{112} &= \sum_i n_{2i}^2 [n_{2i} + y n_{1i}]^2, \\ \Delta N_{155} &= \sum_i n_{1i} n_{2i}^2 [n_{2i} + y n_{1i}], \\ \Phi_1 &= 1 + y \cos \theta_{12}, \quad \Phi_2 = 0.5y + \cos \theta_{12}, \\ \Phi_3 &= \frac{1}{2} + y \cos \theta_{12}, \quad \Phi_4 = y + \cos \theta_{12}, \quad z_{dL} = \frac{\hbar \omega_{dL}}{k_B T}, \\ \tilde{c}_{111} &= c_{111} - 3c_{112} + 2c_{123} + 12c_{144} - 12c_{155} + 16c_{456}, \\ \Delta C &= c_{11} - c_{12} - 2c_{44}, \quad \tilde{c}_{112} = c_{112} - c_{123} - 2c_{144}, \\ \tilde{c}_{155} &= c_{155} - c_{144} - 2c_{456},\end{aligned}\quad (9)$$

где  $c_{ijk}$  — термодинамические модули упругости третьего порядка,  $\mathbf{e}$  — вектор поляризации,  $\omega_{dL}$  — дебаевская частота продольных фононов. Отметим, что первое слагаемое в формуле (8), пропорциональное  $A_{\text{cub}}$ , соответствует изотропному рассеянию, а остальные члены, содержащие модули упругости третьего порядка  $\tilde{c}_{111}$ ,  $\tilde{c}_{112}$ ,  $\tilde{c}_{155}$  и  $\Delta C$ , соответствуют анизотропному рассеянию. Эти

члены отличают кубические кристаллы от изотропной среды — они обращаются в нуль при переходе к модели изотропной среды. Векторы поляризации для рассматриваемых кристаллов определены в работе [7].

Для случая, когда волновой вектор  $\mathbf{q}_1$  направлен вдоль оси  $z$  ( $\mathbf{n}_1 = \{0, 0, 1\}$ ), а вектор поляризации  $\mathbf{e}_1 \{1, 0, 0\}$ , величины  $(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1) = 0$  и  $e_{1i} n_{1i} = 0$  для всех  $i$ , а также  $N_{111} = N_{112} = 0$  и  $\cos \theta_{12} = \cos \theta_2$ . При этом из выражений (7) и (8) для матричного элемента следует результат, полученный в [1] (см. формулу (14)),

$$V_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_3}^{TLL} = 2 \frac{q_1 q_2^3}{q_3} \sin \Theta_2 \cos \varphi_2 (y/2 + \cos \Theta_2) \times \{A_{\text{cub}}(1 + y \cos \Theta_2) + 2\tilde{c}_{155}(\sin \Theta_2)^2(\cos \varphi_2)^2 + (2\tilde{c}_{155} + \Delta C) \cos \Theta_2 (y + \cos \Theta_2)\}. \quad (10)$$

Из сравнения (8) и (10) видно, что для произвольного направления волнового вектора  $\mathbf{q}_1$  матричный элемент содержит ряд новых членов, пропорциональных модулям упругости третьего порядка  $\tilde{c}_{111}$  и  $\tilde{c}_{112}$ , а также слагаемое, пропорциональное величине  $(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_1)$ , которое учитывает продольную компоненту поперечно-продольных колебаний.

В длинноволновом пределе  $y \ll 1$  формулы (8) и (9) для матричного элемента несколько упрощаются

$$N_C = \sum_i n_{1i} n_{2i}^2 [(\mathbf{e}_1 \mathbf{n}_2) n_{2i} + 0.5 e_{1i}],$$

$$N_{112} = \sum_i e_{1i} n_{1i} n_{2i}^2, \quad N_{111} = \sum_i e_{1i} n_{1i} n_{2i}^4,$$

$$N_{155} = \sum_i e_{1i} n_{2i}^2 [n_{2i} \cos \theta_{12} + 0.5 n_{1i}],$$

$$\Delta N_{112} = \sum_i n_{2i}^2 n_{2i}^2, \quad \Delta N_{155} = \sum_i n_{1i} n_{2i}^3,$$

$$\Phi_1 = 1, \quad \Phi_2 = \Phi_4 = \cos \theta_{12}, \quad \Phi_3 = 0.5. \quad (11)$$

В этом приближении при температурах, гораздо меньших температуры Дебая, интеграл по  $z_2$  точно вычисляется, и для скорости релаксации фононов получим

$$v^{TLL}(\theta_1, \varphi_1) = B_0^{TLL}(\theta_1, \varphi_1) z_1 T^5,$$

$$B_0^{TLL}(\theta_1, \varphi_1) = B_0 J(\theta_1, \varphi_1), \quad (12)$$

где

$$J(\theta_1, \varphi_1) = \int_{-1}^1 dx \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta(\cos \theta_{12} - S^{**}) \times \frac{I(\theta_2, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}{(1 + \Delta_2)^8}, \quad x = \cos \theta_2,$$

$$S^{**} = \lim_{y \rightarrow 0} [S^*(1 - \Delta_2) + (\Delta_2 - \Delta_3)/y]. \quad (13)$$

Для вычисления интеграла  $J(\theta_1, \varphi_1)$  необходимо сначала найти корни уравнения

$$F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1) = \cos \theta_{12} - S^{**} = 0 \quad \text{при} \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (14)$$

и снять интеграл по  $x$  при помощи  $\delta$ -функции (при этом корни уравнения (14)  $x_j$  становятся функциями углов  $\varphi_2, \theta_1$  и  $\varphi_1$ ). Тогда выражение для  $J(\theta_1, \varphi_1)$  примет вид

$$J(\theta_1, \varphi_1) = \sum_j \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \frac{I(x_j, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}{(1 + \Delta_2)^8 |F_j^1|},$$

$$F_j^1 = \left. \frac{F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}{dx} \right|_{x=x_j(\varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}. \quad (15)$$

Очевидно, что при учете кубической анизотропии в законе сохранения энергии эта процедура может быть проведена только численным образом.

В квазиизотропном приближении для спектра продольных фононов выполняется условие  $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$ , и уравнение (14) для неизвестной  $x(\varphi_2, \theta_1, \varphi_1)$  сводится к квадратному уравнению

$$\sin \theta_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \sqrt{(1 - x^2)} + \cos \theta_1 x = S^*, \quad (16)$$

корни которого имеют вид

$$x_{1,2} = \left( S^* \cos \theta_1 \mp \sin \theta_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \sqrt{(A - S^{*2})} \right) / A,$$

$$A = (\cos \theta_1)^2 + (\sin \theta_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1))^2. \quad (17)$$

При  $0 \leq \theta_1 \leq \arccos(S^*(\theta_1, \varphi_1))$  уравнение (12) имеет одно решение  $x = x_1^*(\varphi_2, \theta_1, \varphi_1)$ , при этом

$$J(\theta_1, \varphi_1) = \frac{2}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \frac{I(x_1, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)(S^* - x_1 \cos \theta_1)}{|x_1 - x_2| A}. \quad (18)$$

Для углов  $\arccos(S^*(\theta_1, \varphi_1)) \leq \theta_1 \leq \pi/2$  уравнение (12) имеет два решения  $x = x_{1,2}$ , при этом

$$J(\theta_1, \varphi_1) = \frac{2}{\pi} \times \int_{\varphi_1-b}^{\varphi_1+b} d\varphi_2 \frac{[I(x_1, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)(S^* - x_1 \cos \theta_1) + I(x_2, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)(S^* - x_2 \cos \theta_1)]}{|x_1 - x_2| A},$$

$$b = \arccos \sqrt{\frac{S^{*2} - (\cos \theta_1)^2}{(\sin \theta_1)^2}}. \quad (19)$$

Нетрудно убедиться, что выражения (15) и (18), (19) для интеграла  $J(\theta_1, \varphi_1)$  эквивалентны, поскольку в квазиизотропном приближении для спектра продольных фононов

**Таблица 1.** Значения термодинамических модулей упругости для исследованных кубических кристаллов (в единицах  $10^{12}$  дин/см<sup>2</sup>), данные взяты из работы [16]

Модули упругости	Ge	Si	Алмаз	InSb	KCl	NaCl	GaAs
$c_{11}$	1.289	1.657	10.76	0.672	0.398	0.487	0.192
$c_{12}$	0.483	0.638	1.25	0.367	0.062	0.124	0.0599
$c_{44}$	0.671	0.796	5.758	0.302	0.0625	0.126	0.0538
$\Delta C$	0.54	0.57	2.01	0.3	-0.211	-0.11	-0.0245
$c_{111}$	-7.10	-8.25	-62.6	-3.56	-7.01	-8.8	-6.22
$c_{112}$	-3.89	-4.51	-22.6	-2.66	-0.571	-0.571	-3.87
$c_{123}$	-0.18	-0.64	1.12	-1.0	0.284	0.284	-0.57
$c_{144}$	-0.23	0.12	-6.74	0.16	0.127	0.257	0.02
$c_{155}$	-2.92	-3.10	-28.6	-1.39	-0.245	-0.611	-2.69
$c_{456}$	-0.53	-0.64	-8.23	-0.004	0.118	0.271	-0.39
$A_{\text{cub}}$	-0.084	0.71	-27.88	1.57	0.98	2.09	-1.29
$\tilde{c}_{155}$	-1.63	-1.9	-5.4	-1.54	-0.61	-1.41	-1.93
$\tilde{c}_{111}$	28.01	32.4	138.1	20.96	1.62	8.23	30.53
$\tilde{c}_{112}$	-3.25	-4.1	-10.24	-1.98	-1.11	-1.37	-3.34

**Таблица 2.** Значения параметров, определяющих скорости релаксации квазипоперечных фононов, в исследованных кубических кристаллах

Вещество	$\langle S_L \rangle$ , cm/s	$S^*$ [100]	$B_0 \cdot 10^{24}$ , cm <sup>4</sup> · dyn <sup>-2</sup> · s <sup>-1</sup> · K <sup>-5</sup>		$B_0^{TLL}$ , s <sup>-1</sup> · K <sup>-5</sup>			
			[100]	[110] ( $t_2$ )	[100]	[110] ( $t_1$ )	[110] ( $t_2$ )	[111]
Ge	5.334	0.666	0.239	0.309	0.87	0.55	0.153	0.24
Si	9.019	0.649	0.026	0.032	0.071	0.052	0.019	0.023
Алмаз	18.167	0.705	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-5}$	0.0057	0.0045	0.00054	0.0016
InSb	3.72	0.616	5.23	7.35	2.43	1.99	0.794	0.74
KCl	4.025	0.4398	88.67	53.88	0.627	0.28	106.5	79.3
NaCl	4.534	0.5326	19.32	16.09	1.13	1.3	41.9	23.6
GaAs	1.853	0.545	$3.99 \cdot 10^3$	$3.63 \cdot 10^3$	$1.63 \cdot 10^4$	$2.05 \cdot 10^4$	$5.2 \cdot 10^3$	$8 \cdot 10^3$

имеем

$$\left| \frac{dF_0(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)}{dx} \right|^{-1} \Big|_{x=x_{1,2}} = \frac{2(S^* - x_{1,2} \cos \theta_1)}{|x_1 - x_2|A}, \quad (20)$$

где  $F_0(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1) = \sqrt{(1-x^2)} \sin \theta_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + x \cos \theta_1 - S^*$ . Следует отметить, что имеется второй вариант расчета скоростей релаксации фононов, который позволяет избавиться от процедуры нахождения корней уравнения (14)  $F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1) = 0$ , однако требует вычисления двукратного интеграла  $J(\theta_1, \varphi_1)$  вместо однократного. Он заключается в замене  $\delta$ -функции, входящей в выражение (12), на ее представление в виде предельного перехода от лоренцевской или гауссовской функций

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

$$\delta(F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1)) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\sqrt{\pi\varepsilon}} \exp\left(-\frac{(F(x, \varphi_2, \theta_1, \varphi_1))^2}{4\varepsilon}\right). \quad (21)$$

Численный анализ показал, что гауссовская аппроксимация дает лучшее приближение  $\delta$ -функции при расчете скоростей релаксации, поскольку на крыльях она убывает существенно быстрее, чем лоренцевская. Вычисленные величины  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$  в этом варианте согласуются с точными вычислениями в пределах погрешности, не превышающей 0.1% при  $\varepsilon = 10^{-4}$ .

## 2. Результаты численного анализа

Формулы (11)–(19) позволяют рассчитать коэффициент  $B_0^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$ , который характеризует зависимости скоростей релаксации от направления волнового вектора квазипоперечных фононов для механизма Ландау–Румера как в квазиизотропном приближении, так и при точном учете кубической анизотропии в законе сохранения энергии. Такие зависимости приведены на рис. 1 и 2 для двух наиболее актуальных случаев, когда волновые векторы фононов лежат в плоскостях граней куба или в диагональных плоскостях. В расчетах использованы экспериментально определенные значения термодинамических модулей упругости второго  $c_{ik}$  и

третьего  $c_{ijk}$  порядков, взятые из работы [16] (табл. 1, а также табл. 1 и 2 в работах [1,2]). Как видно из рис. 1 и 2 (штриховые линии), квазиизотропное приближение не является адекватным для количественного описания анизотропии скоростей релаксации квазиперечных фононов в кубических кристаллах. Оно дает значения скоростей релаксации  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$ , приблизительно в 1.5 раза меньшие для направлений типа [001], и существенно более слабые угловые зависимости для всех исследованных случаев. С другой стороны, точный учет кубической анизотропии в законе сохранения энергии (см. (7)) и линейное приближение по параметру анизотропии  $\Delta_L(\theta, \varphi)$  (см. (7a)) дают значения для скоростей релаксации  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$ , отличающиеся несущественно: различие не превышает 1%. Поэтому на приведенных рисунках соответствующие кривые неразличимы.

Анализируя результаты расчета, прежде всего следует отметить качественное различие угловых зависимостей скоростей релаксации квазиперечных фононов в кубических кристаллах с положительной  $\Delta C > 0$  (Ge, Si, алмаз и InSb) и отрицательной  $\Delta C < 0$  (KCl, NaCl) анизотропией упругих модулей второго порядка (табл. 1 в работе [7]). Для кристаллов первого типа (Ge, Si, алмаз и InSb) максимальные значения скоростей релаксации  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$  достигаются в кристаллографических направлениях типа [100], а минимальные значения — в направлениях типа [011]. В противоположность этому для второго типа кристаллов (KCl, NaCl) максимальные значения скоростей релаксации  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$  достигаются в кристаллографических направлениях типа [011], а минимальные значения — в направлениях типа [001]. Причем максимальные значения скоростей релаксации для ионных кристаллов KCl, NaCl оказываются на два порядка больше, чем для Ge, тогда как их минимальные значения по порядку величины близки. Таким образом, угловые зависимости скоростей релаксации для кристаллов первого и второго типа имеют обратный характер.

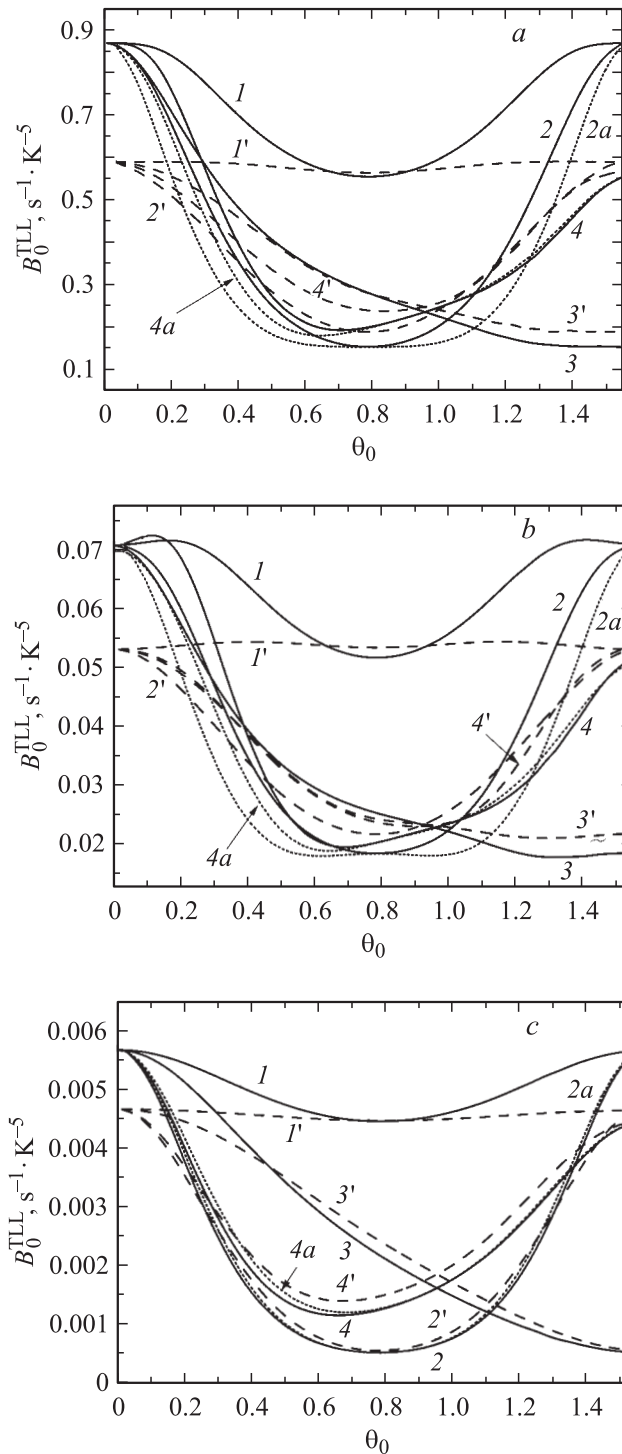
Для кристаллов первого типа значения скоростей релаксации  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$  уменьшаются приблизительно на порядок величины при переходе от кристаллов Ge к Si и от кристаллов Si к алмазу. Это уменьшение обусловлено главным образом изменением коэффициента  $B_0$  (табл. 2), который определяется упругими модулями второго порядка (см. (6)). При переходе от кристаллов Ge к Si коэффициент  $B_0$  уменьшается на порядок величины, а при переходе от кристаллов Si к алмазу коэффициент  $B_0$  уменьшается на три порядка величины. Однако два порядка величины в кристаллах алмаза компенсируются за счет больших величин упругих модулей третьего порядка, определяющих вероятность ангармонических процессов рассеяния (табл. 1). Рост величин скоростей релаксации на два порядка в кристаллах KCl и на четыре порядка в кристаллах GaAs по сравнению с кристаллами Ge связан в основном с изменением коэффициента  $B_0$  (табл. 2). Отметим, что в кристаллах GaAs модули упругости второго порядка  $c_{ik}$  аномально

малы. Они на порядок меньше, чем в кристаллах Ge и InSb (табл. 1).

Рассмотрим более подробно случай, когда волновые векторы квазиперечных фононов  $\mathbf{q}_1$  лежат в плоскости грани куба ( $\varphi_1 = 0$ ). В этом случае для чистой (изотропной) моды  $\mathbf{t}_1 (S_{t1})(\theta_1, 0) = \sqrt{c_{44}/\rho} = \text{const}$  с вектором поляризации, перпендикулярным рассматриваемой грани куба, величина  $S^*(\theta_1, 0) = \text{const}$ . Для этой моды скорости релаксации в кристаллах Ge, Si и алмаза в квазиизотропном приближении слабо меняются с изменением угла  $\theta_1$ . Эти изменения связаны с анизотропией матричного элемента трехфононных процессов рассеяния, т.е. с анизотропией упругих модулей третьего порядка. Однако учет кубической анизотропии в законе сохранения энергии, обусловленной упругими модулями второго порядка, приводит к значительному изменению угловых зависимостей скоростей релаксации для этой моды (кривые 1 на рис. 1): отношение максимальных значений  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \varphi_1)$  в направлении [100] к минимальным значениям в кристаллографическом направлении [011] составляет 1.55, 1.4 и 1.3 для Ge, Si и алмаза соответственно. Для медленной квазиперечной моды  $t_2$  с вектором поляризации в плоскости грани куба ( $S_{t2} = S'_{100} \sqrt{1 + \frac{c_{11}-c_{44}}{c_{44}} (1/2 - \sqrt{1/4 + (k^2 - 1)\xi})}$ ), как видно из рис. 1 (кривые 2), скорости релаксации в кристаллах Ge, Si и алмаза уменьшаются более значительно при переходе от направления [001] ( $\theta_1 = 0$ ) к направлению [101] ( $\theta_1 = \pi/4$ ). Отношение значений  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, 0)$  в направлении [100] к минимальным значениям в кристаллографических направлениях типа [011] составляет приблизительно 5.5, 3.8 и 10.6 для кристаллов Ge, Si и алмаза соответственно (табл. 2).

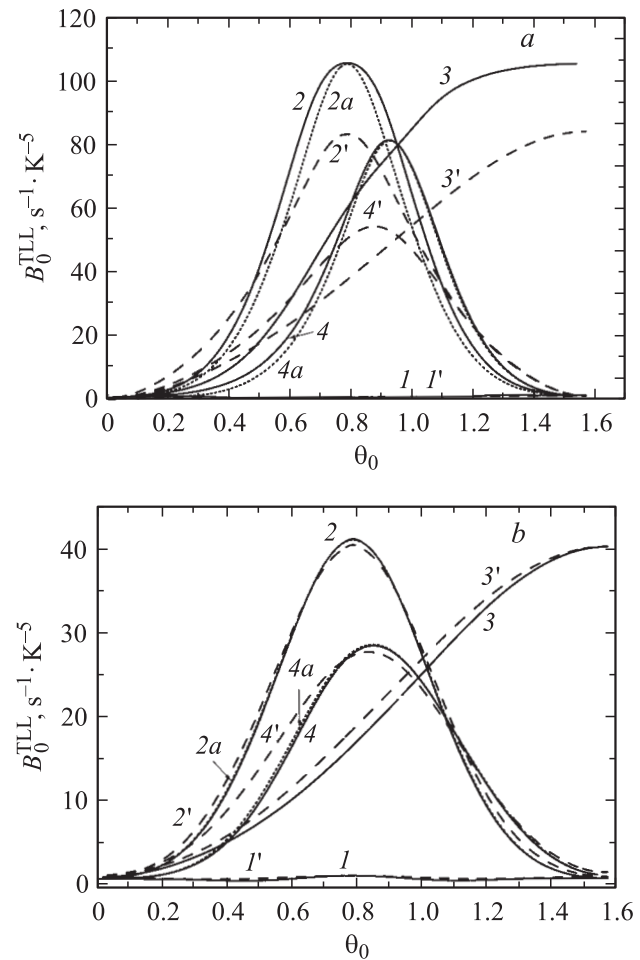
Для чистой моды  $t_1 (S_{t1}(\theta, \frac{\pi}{4}) = S'_{100} \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}} \sin^2 \theta})$  с волновым вектором в диагональной плоскости ( $\varphi_1 = \pi/4$ ) и вектором поляризации, перпендикулярным этой плоскости, скорости релаксации в кристаллах Ge, Si и алмаза монотонно уменьшаются с увеличением угла  $\theta_1$ , достигая минимальных значений для направления [011] ( $\theta_1 = \pi/2$ ), соответствующих моде  $t_2$  в плоскости грани куба ( $\varphi_1 = 0, \theta_1 \cong \pi/4$ ). Для квазиперечной моды  $t_2$  с вектором поляризации в диагональной плоскости ( $\varphi_1 = \pi/4$ ) скорости релаксации в кристаллах Ge, Si и алмаза уменьшаются от максимальных значений в направлении [001] ( $\theta_1 = 0$ ), достигают минимума в окрестности угла  $\theta_1 \cong \pi/4$ , затем возрастают и при  $\theta_1 = \pi/2$  приближаются к значениям  $v_{phN}^{TLL} = v(\theta_1, \pi/4)$ , соответствующим быстрой моде в плоскости грани куба (кривые 4 на рис. 1). Итак, в кристаллах первого типа максимальная анизотропия скоростей релаксации квазиперечных мод имеет место для алмаза. Она связана главным образом с анизотропией модулей упругости третьего порядка, поскольку анизотропия упругих модулей второго порядка убывает при переходе от кристаллов Ge к кристаллам Si и алмаза [7].

Для кубических кристаллов с отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка (KCl, NaCl)



**Рис. 1.** Зависимости скоростей релаксации квазипоперечных фононов от направления волнового вектора поперечных фононов для кубических кристаллов Ge (a), Si (b) и алмаза (c), рассчитанные в квазиизотропном приближении (кривые 1'–4') и при точном учете кубической анизотропии в законе сохранения энергии (кривые 1–4): 1, 2 — для волновых векторов в плоскости грани куба; 3, 4 — для волновых векторов в диагональной плоскости; 1, 3 — для чистых мод с векторами поляризации, перпендикулярными рассматриваемым плоскостям; 2, 4 — для квазипоперечных мод с векторами поляризации, лежащими в рассматриваемых плоскостях; 2a, 4a — для чисто поперечных мод.

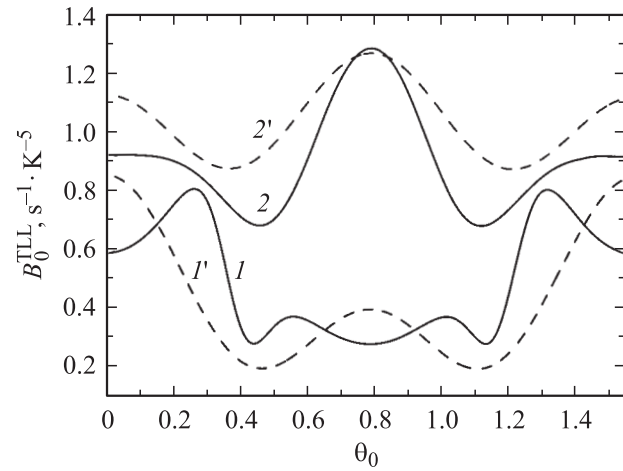
угловые зависимости скоростей релаксации фононов имеют вид, обратный виду аналогичных зависимостей для кристаллов первого типа. В кристаллах Ge для квазипоперечной моды  $t_2$  с волновым вектором и вектором поляризации фонона, расположенным в плоскости грани куба, скорость релаксации сначала уменьшается от максимального значения при  $\theta_1 = 0$ , достигая минимума при  $\theta_1 = \pi/4$ , а затем возвращается к исходному значению при  $\theta_1 = \pi/2$  (кривые 2 на рис. 1). В противоположность этому, для этой же моды скорость релаксации в кристаллах второй группы резко возрастает от минимального значения при  $\theta_1 = 0$ , достигает максимума при  $\theta_1 = \pi/4$ , увеличиваясь в 180 и 45 раз для кристаллов KCl и NaCl соответственно, а затем уменьшается к



**Рис. 2.** Зависимости скоростей релаксации квазипоперечных фононов от направления волнового вектора поперечных фононов для кубических кристаллов KCl (a) и NaCl (b), рассчитанные в квазиизотропном приближении (кривые 1'–4') и при точном учете кубической анизотропии в законе сохранения энергии (кривые 1–4): 1, 2 — для волновых векторов в плоскости грани куба; 3, 4 — для волновых векторов в диагональной плоскости; 1, 3 — для чистых мод с векторами поляризации, перпендикулярными рассматриваемым плоскостям; 2, 4 — для квазипоперечных мод с векторами поляризации, лежащими в рассматриваемых плоскостях; 2a, 4a — для чисто поперечных мод.

исходному значению при  $\theta_1 = \pi/2$  (кривые 2 на рис. 2). Аналогичная ситуация имеет место и для скоростей релаксации поперечных мод с волновыми векторами в диагональной плоскости ( $\varphi_1 = \pi/4$ ). Так, например, для квазипоперечной моды  $t_2$  с волновым вектором и вектором поляризации фонона в диагональной плоскости максимальное значение скорости релаксации в кристаллах KCl достигается при  $\theta_1 \cong 0.9$  и оказывается в 1.3 раза меньше, чем для квазипоперечной моды с волновым вектором в плоскости грани куба (кривые 4 на рис. 2). Однако минимальное значение для этой моды реализуется при  $\theta_1 = \pi/2$ , и оно в 2 раза меньше, чем при  $\theta_1 = 0$ . Поэтому для этой моды скорость релаксации уменьшается в 294 раза при переходе от величины  $v_{phN}^{TLL}(\theta_1, \pi/4)$  при  $\theta_1 \cong 0.9$  к ее значению при  $\theta_1 = \pi/2$ . Для чистой моды  $t_1$  с волновым вектором в диагональной плоскости и вектором поляризации, перпендикулярным этой плоскости, скорости релаксации в кристаллах KCl и NaCl являются монотонно возрастающими функциями угла  $\theta_1$  в интервале  $0 \leq \theta_1 \leq \pi/2$ , увеличиваясь в 180 и 45 раз для кристаллов KCl и NaCl соответственно. Таким образом, анизотропия скоростей релаксации в кристаллах NaCl на порядок больше, а в кристаллах KCl на два порядка больше, чем в кристаллах Ge и Si.

Аномально большие значения анизотропии скоростей релаксации квазипоперечных мод в кристаллах KCl и NaCl обусловлены упругой анизотропией третьего порядка, т. е. анизотропией ангармонической энергии кристаллов. Дело в том, что в скорости релаксации фононов, распространяющихся вдоль ребер куба, вносят вклад только слагаемые, пропорциональные упругим модулям третьего порядка  $A_{cub}$  и  $\tilde{c}_{155}$  (см. (10)), которые для этих кристаллов имеют противоположные знаки (табл. 1). В результате их вклады в значительной степени компенсируют друг друга, вследствие чего скорости релаксации фононов для этих направлений должны быть аномально малы по сравнению с Ge, где такой компенсации не происходит. Однако для этих кристаллов модуль упругости второго порядка и соответственно скорости звука существенно меньше, чем в кристаллах Ge. Поэтому коэффициент  $B_0$  в кристаллах KCl и NaCl оказывается приблизительно на два порядка величины больше, чем в кристаллах Ge. Действие этих двух противоположных факторов приводит к тому, что скорости релаксации фононов для этого направления в кристаллах KCl, NaCl и Ge имеют один порядок величины (табл. 2). С другой стороны, в скорости релаксации поперечных фононов, распространяющихся вдоль диагоналей граней куба, вносят вклад члены, пропорциональные не только упругим модулям третьего порядка  $A_{cub}$  и  $\tilde{c}_{155}$ , но и модулям  $\tilde{c}_{111}$  и  $\tilde{c}_{112}$  (см. (8)). Поэтому для кристаллографических направлений типа [101] такой компенсации в матричном элементе трехфононных процессов рассеяния не происходит (табл. 1), и благодаря коэффициенту  $B_0$  скорости релаксации фононов в кристаллах KCl и NaCl для этого направления оказываются на два порядка



**Рис. 3.** Угловые зависимости скоростей релаксации в кристаллах второго типа KCl ( $I$  и  $I'$ ) и NaCl ( $2$  и  $2'$ ) для чистой моды с волновым вектором в плоскости грани куба и вектором поляризации, перпендикулярным этой плоскости, рассчитанные в квазиизотропном приближении (кривые  $I'$ ,  $2'$ ) и при точном учете кубической анизотропии в законе сохранения энергии (кривые  $I$ ,  $2$ ).

больше, чем в кристаллах Ge. Можно отметить, что для кристаллов NaCl, в отличие от KCl и кристаллов первой группы, погрешность квазиизотропного приближения не превышает 5%.

Для кристаллов GaAs угловые зависимости скоростей релаксации качественно отличаются от таковых в кристаллах KCl и NaCl и имеют такой же вид, как и для кристаллов первой группы. GaAs в соответствии с классификацией по упругим модулям второго порядка относится к кристаллам второй группы: спектр колебательных мод для него качественно такой же, как и в кристаллах KCl и NaCl. Однако, в отличие от чисто ионных кристаллов KCl и NaCl, в кристаллах GaAs упругие модули третьего порядка  $A_{cub}$  и  $\tilde{c}_{155}$  имеют одинаковый (отрицательный) знак. А упругий модуль  $\tilde{c}_{111}$  имеет противоположный знак, и по абсолютной величине он превосходит модули  $A_{cub}$  и  $\tilde{c}_{155}$  примерно в 20 раз. Поэтому усредненный по углам квадрат матричного элемента трехфононных процессов рассеяния уменьшается приблизительно в 4 раза при переходе от направлений типа [001] к направлениям типа [101]. В результате угловые зависимости скоростей релаксации в кристаллах GaAs оказываются такого же вида, как и для исследованных кристаллов первой группы. Итак, вывод из проведенного анализа очевиден: характерные типы угловых зависимостей скоростей релаксации кубических кристаллов определяются не только значениями упругих модулей второго порядка, но и соотношением величин и знаков упругих модулей третьего порядка, входящих в ангармоническую энергию кристаллов.

Еще более значительно различаются угловые зависимости скоростей релаксации в кристаллах первого и второго типа для чистой моды  $t_1$  с волновым вектором



в плоскости грани куба ( $\varphi_1 = 0$ ) и вектором поляризации, перпендикулярным этой плоскости (кривые 1 на рис. 1–3). Эта мода является быстрой в кристаллах первого типа и медленной в кристаллах второго типа. Для этой моды зависимости скорости релаксации от угла  $\theta_1$  в кристаллах KCl и NaCl имеют более сложный вид (рис. 3), чем в кристаллах первого типа. Причем в кристаллах KCl учет кубической анизотропии в законе сохранения энергии приводит к качественному изменению угловых зависимостей скоростей релаксации для медленной изотропной моды. В квазиизотропном приближении скорость релаксации для кристаллов KCl (кривая 1' на рис. 3) имеет максимальные значения в кристаллографических направлениях типа [001] ( $\theta_1 = 0, \pi/2$ ), локальный максимум в направлениях типа [101] ( $\theta_1 = \pi/4$ ) и два минимума при  $\theta_1 \cong 0.5$  и  $\theta_1 \cong 1.1$ . В противоположность этому при точном учете кубической анизотропии значение скорости релаксации в направлениях типа [001] уменьшается в 1.4 раза по сравнению с квазиизотропным приближением, и функция  $v_{phN}^{TL}(\theta_1, 0)$  в этом случае имеет локальный минимум (кривая 1 на рис. 3). Максимальные значения скорости релаксации достигаются при значениях углов  $\theta_1 \cong 0.25$  и  $\theta_1 \cong 1.32$ , а минимальные — при  $\theta_1 \cong 0.44$ ,  $\theta_1 = \pi/4$  и  $\theta_1 \cong 1.13$ , причем при  $\theta_1 \cong 0.57$  и  $\theta_1 \cong 1.01$  функция  $v_{phN}^{TL}(\theta_1, 0)$  имеет два одинаковых по величине локальных максимума. Максимальные значения  $v_{phN}^{TL}(\theta_1, 0)$  для углов  $\theta_1 \cong 0.25$  и  $\theta_1 \cong 1.32$  превосходит минимальные величины скорости релаксации, соответствующие углам  $\theta_1 \cong 0.47$  и  $\theta_1 \cong 1.1$ , более чем в 3 раза. Таким образом, для этой моды в кристаллах второго типа квазиизотропное приближение является недостаточным даже для качественного описания угловых зависимостей скоростей релаксации фононов.

На рис. 1 и 2 (пунктирные кривые 2а и 4а) приведен расчет скорости релаксации квазиперечных фононов  $t_2$  в приближении чистых мод, т.е. при замене векторов поляризации квазиперечных мод на векторы поляризации чистых мод ( $e_0^2 = (\cos \theta, 0, -\sin \theta)$  — для волновых векторов в плоскости грани куба и  $e_0^2 = (\cos \theta/\sqrt{2}, \cos \theta/\sqrt{2}, -\sin \theta)$  — для волновых векторов в диагональной плоскости). Как показали оценки, максимальный вклад продольной компоненты в скорость релаксации квазиперечных мод достигает 30% для кристаллов Ge и Si (кривые 2а на рис. 1) и уменьшается для алмаза до 6% для волновых векторов в плоскости грани куба. Для волновых векторов в диагональной плоскости максимальные величины этого вклада составляют 22, 20 и 10% для кристаллов Ge, Si и алмаза соответственно (кривые 4а на рис. 1). Этот результат согласуется с анализом векторов поляризации, проведенным в работе [7], где было показано, что максимальный вклад продольной составляющей в поперечно-продольные колебания составляет 16.5% для Ge, 10% для Si и 8% для алмаза. Для кристаллов второй группы KCl и NaCl максимальный вклад продольной компоненты в скорость релаксации квазиперечных мод для волновых векторов в плоскости грани куба составляем

23 и 2% соответственно, достигает 60% в кристаллах KCl и уменьшается до 16% в кристаллах NaCl для волновых векторов в диагональной плоскости. Поскольку в кубических кристаллах в симметричных направлениях, таких как [100], [110] и [111], распространяются чистые моды [4–6], скорости релаксации квазиперечных колебаний и чистых мод для этих направлений должны совпадать. Это и следует из проведенного нами анализа: кривые 2 и 4 на рис. 1 и 2 в этих направлениях совпадают с кривыми 2а и 4а для кристаллов как первой, так и второй группы. Этот результат является дополнительным аргументом в пользу корректности проведенных численных расчетов.

Итак, предложен метод расчета и рассчитаны скорости релаксации длинноволновых квазиперечных мод в ангармонических процессах рассеяния для большой совокупности кубических кристаллов. Проанализированы зависимости скоростей релаксации квазиперечных фононов в кубических кристаллах от направления волнового вектора фононов для механизма Ландау–Румера как в квазиизотропном приближении, так и при точном учете кубической анизотропии в законе сохранения энергии. Рассмотрены два наиболее актуальных случая, когда волновые векторы фононов лежат в плоскостях граней куба или в диагональных плоскостях. Показано, что квазиизотропное приближение не является адекватным для количественного описания анизотропии скоростей релаксации квазиперечных фононов. Проведенный анализ показал, что угловые зависимости скоростей релаксации квазиперечных фононов в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка качественно отличаются. Причем анизотропия скоростей релаксации в кристаллах второго типа на порядок (NaCl) и на два порядка (KCl) больше, чем в кристаллах первого типа — Ge и Si. Даны оценки вкладов продольных компонент квазиперечных колебаний в скорость релаксации квазиперечных мод, которые качественно согласуются с анализом векторов поляризации, проведенным в работе [7]. Полученные результаты будут использованы при расчетах поглощения ультразвука и фононного транспорта в кубических кристаллах.

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

## Список литературы

- [1] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ЖЭТФ **126**, 129 (2004); ФТТ **47**, 300 (2005).
- [2] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, А.В. Инюшкин, В.И. Ожогин. ЖЭТФ **128**, 370 (2005).
- [3] L. Landau, J. Rumer. Sov. Phys. **11**, 18 (1937).
- [4] Ф.И. Федоров. Теория упругих волн в кристаллах. Наука, М. (1965).
- [5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987).

- [6] В. Truel, С. Elbaum, В.В. Chick. Ultrasonic methods in solid state physics. Academic press, N.Y.–London (1969).
- [7] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ФТТ **49**, 422 (2007).
- [8] В.Л. Гуревич. Кинетика фононных систем. Наука, М. (1980).
- [9] Дж. Такер, В. Рэмington. Гиперзвук в физике твердого тела. Мир, М. (1975).
- [10] H.J. Maris. Phys. Acoustics VII, 280 (1971).
- [11] Б.М. Могилевский, А.Ф. Чудновский. Теплопроводность полупроводников. Наука, М. (1972).
- [12] А.П. Жернов, А.В. Инюшкин. Изотопические эффекты в твердых телах. Российский научный центр „Курчатовский институт“, М. (2001).
- [13] А.П. Жернов, А.В. Инюшкин. УФН **171**, 827 (2001); УФН **172**, 573 (2002).
- [14] R.A.N. Hamilton, J.E. Parrot. Phys. Rev. **178**, 1284 (1969).
- [15] Р. Берман. Теплопроводность твердых тел. Мир, М. (1962).
- [16] И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Наук. думка, Киев (1982).