

03,10,19

## Анизотропия длин свободного пробега фононов в монокристаллических пленках Ge, Si, алмаза при низких температурах

© И.И. Кулеев

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия

E-mail: kuleyev11@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 13 июля 2016 г.)

Рассмотрены физические аспекты влияния анизотропии упругой энергии кристаллов на анизотропию длин свободного пробега фононов в монокристаллических пленках Ge, Si, алмаза при диффузном рассеянии фононов на границах. Показано, что длины свободного пробега фононов для достаточно широких пленок Ge, Si, алмаза с ориентациями  $\{100\}$  и  $\{111\}$  и длинами пленок, меньшими или равными их ширины, являются изотропными (не зависят от направления градиента температуры в плоскости пленки). А анизотропии длин пробега фононов зависит главным образом от ориентации плоскости пленки и определяется фокусировкой и дефокусировкой фононных мод. Для пленок Ge, Si, алмаза с ориентациями  $\{100\}$  и  $\{111\}$  и длинами пленок, гораздо больших их ширины, длины свободного пробега фононов становятся анизотропными.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема „Спин“ № 01201463330) при поддержке Программы УрО РАН (проект № 15-17-2-17) и Минобрнауки РФ (грант № 14.Z50.31.0025).

DOI: 10.21883/FTT.2017.04.44267.294

### 1. Введение

Большой интерес в последнее десятилетие вызывают исследования фононного транспорта в пленках Ge, Si, алмаза [1–4]. Он связан с широким использованием пленок из этих материалов в микроэлектронике. Поскольку длины свободного пробега фононов для достаточно тонких пленок в широком температурном интервале оказываются больше или сравнимы с их толщинами, то рассеяние фононов на границах играет важную роль в теплосопротивлении и приводит к значительному уменьшению их теплопроводности по сравнению с величинами в объемных материалах. Для объемных кристаллов кремния [5] граничное рассеяние фононов вносит заметный вклад в теплосопротивление при температурах, меньших 30–40 К, однако для кремниевых нанопленок с толщиной 50 nm, согласно оценкам [6,7], оно остается эффективным вплоть до комнатных температур.

В настоящей работе мы рассмотрим особенности фононного транспорта в пленках Ge, Si, алмаза в рамках феноменологического метода Казимира–Мак-Карди [5,8]. Известно [9–11], что анизотропия упругой энергии кубических кристаллов приводит к неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононов и их фокусировке. Экспериментальные исследования [5] показали, что при достаточно низких температурах, когда длина свободного пробега фононов превышает поперечный размер образца, фокусировка фононов приводит к анизотропии теплопроводности объемных кристаллов Si и CaF<sub>2</sub>.

В этом методе предполагается, что при диффузном рассеянии фононов абсолютно шероховатая поверхность

поглощает все падающие на нее фононы, а затем переизлучает их, как абсолютно черное тело с интенсивностью, зависящей от локальной температуры. Согласно [12,13], диффузный характер рассеяния фононов реализуется, если геометрические параметры шероховатостей на границе образца будут больше или сравнимы с длиной волны фонона.

Следует отметить, что в значительном числе публикаций (см., например, [14–19]) граничное рассеяние фононов в достаточно тонких пленках учитывалось аналогично тому, как это было сделано в работах Фукса [20] и Зондгеймера [21] при анализе проводимости тонких металлических пленок. В этих работах граничное рассеяние фононов рассматривалось в модели изотропной среды и предполагалось, что длины свободного пробега и времена релаксации фононов в пленках зависят только от ее толщины [14–19]. Учет граничного рассеяния в рамках теории [20,21] приводит к некорректным результатам для анизотропии теплопроводности и ее зависимостей от геометрических параметров и ориентаций плоскостей пленок [14–19]. Согласно [6,22,23] теплопроводность пленок и длин пробега фононов существенно зависит от геометрических размеров. Более того, в [6,22] показано, что длины Казимира в модели изотропной среды не только существенно зависят от ширины пленки, но и логарифмически расходятся при стремлении ее ширины к бесконечности. Как отмечалось в [6,22], эта расходимость обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. В работах [24] показано, учет конечной длины пленки приводит к устранению этой расходимости, а учет фокусировки фононов приводит к зависимости теплопроводности наноструктур

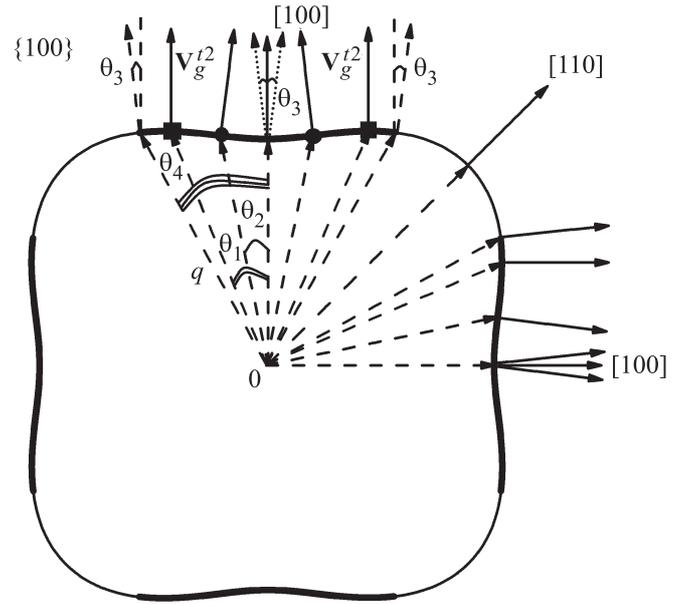
от направления потока тепла и ориентации плоскости пленки.

Настоящая работа является продолжением наших исследований фононного транспорта в монокристаллических пленках с различным типом анизотропии упругой энергии, предпринятых в работе [24]. Основное внимание в ней было уделено изменению анизотропии теплопроводности при переходе от нанопроводов с квадратным сечением к достаточно широким пленкам из кристаллов с положительной  $k - 1 > 0$  (GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) и отрицательной  $k - 1 < 0$  (CaF<sub>2</sub>, NaCl, YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка ( $k - 1 = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11}) / (c_{11} - c_{44})$ , где  $c_{ij}$  — упругие модули второго порядка). Показано, что анизотропия теплопроводности для наноструктур из кристаллов с положительной и отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка качественно отличается, как для нанопленок, так и для нанопроводов. Для квадратных пленок определены ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный и минимальный теплоотвод от элементов полупроводниковых микросхем. Оказалось, что теплопроводность их для ориентаций {100} и {111} изотропна в плоскости пленки, однако для пленок Si с ориентацией {100} она в 2.5 раза больше, чем для ориентации {111}.

В отличие от работы [24], здесь мы проанализируем угловые зависимости длин свободного пробега фононов для всех акустических мод при вращении градиента температуры в плоскостях квадратных пленок с различными ориентациями плоскостей и дадим простое физическое объяснение, почему зависимости теплопроводности и длин пробега фононов различных поляризаций для пленок с ориентациями {100} и {111} являются изотропными, а для ориентаций {110} становятся анизотропными. Основной задачей настоящей работы является исследование влияния фокусировки фононов на особенности распространения фононов различных поляризаций в монокристаллических пленках Ge, Si, алмаза с различным соотношением геометрических параметров.

## 2. Фокусировка фононов и плотность фононных состояний в кристаллах Ge, Si алмаза

Прежде чем переходить исследованию фононного транспорта в пленках рассмотрим фокусировку фононов в кристаллах Ge, Si, алмаза при низких температурах, когда доминирующую роль играет диффузное рассеяние фононов на границах образца. Этот эффект связан с неколлинеарностью фазовой и групповой скорости фононов. Для определения этих скоростей воспользуемся моделью анизотропного континуума. В этой модели спектр фононов с поляризацией  $\lambda$  при  $q \ll q_D$  может



**Рис. 1.** Сечение изоэнергетической поверхности медленной поперечной моды плоскостью {100} в кристаллах Si. Внутри поверхности стрелками изображены волновые векторы, а вне ее соответствующие им групповые скорости фононов. Квадратиками обозначены положения, в которых вектора групповых скоростей совпадают с направлением фокусировки  $V_g^{\lambda} \uparrow \uparrow [001]$ , а кружочками — положения точек нулевой кривизны на данной кривой.

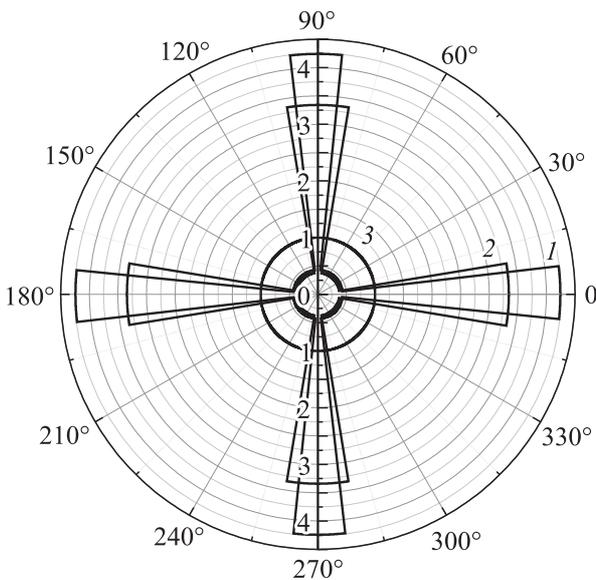
быть представлен в виде

$$\omega_q^{\lambda} = S^{\lambda}(\theta, \varphi)q. \tag{1}$$

Фазовая скорость  $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$  определяет анизотропию спектра. Для кубических кристаллов она определена в [25]. Максимальную анизотропию имеет медленная поперечная мода  $t_2$  (см. [25], рис. 1). Проиллюстрируем фокусировку фононов на примере этой моды. Построим для нее изоэнергетическую поверхность (рис. 1). Групповая скорость фонона, определяющая направление переноса энергии, перпендикулярна этой поверхности. Для произвольного направления волнового вектора она может быть представлена в виде [25]

$$\begin{aligned} V_g^{\lambda}(\theta, \varphi) &= S^{\lambda}(\theta, \varphi) \tilde{V}_g^{\lambda}(\theta, \varphi), \\ \tilde{V}_g^{\lambda}(\theta, \varphi) &= \mathbf{n} + S_{\theta}^{\lambda} \mathbf{e}_{\theta} + S_{\varphi}^{\lambda} \mathbf{e}_{\varphi}, \\ S_{\theta}^{\lambda}(\theta, \varphi) &= \left( \frac{1}{S^{\lambda}} \right) \frac{\partial S^{\lambda}}{\partial \theta}, \\ S_{\varphi}^{\lambda}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sin \theta} \left( \frac{1}{S^{\lambda}} \right) \frac{\partial S^{\lambda}}{\partial \varphi}. \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь  $\mathbf{e}_{\theta} = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta)$ ,  $\mathbf{e}_{\varphi} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$ , а вектор  $\mathbf{n}$  определен выше. Вектора  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{e}_{\theta}$  и  $\mathbf{e}_{\varphi}$  образуют взаимно ортогональную тройку единичных векторов.



**Рис. 2.** Угловое распределение плотности состояний медленной квазипоперечной моды для волновых векторов в плоскости  $\{100\}$  для кристаллов Si (кривая 1), Ge (кривая 2), для модели изотропной среды (кривая 3).

Как видно из рис. 1, медленная поперечная мода фокусируется в направлениях типа  $[100]$ . Угол  $\theta_1$  определяет направление волнового вектора, для которого вектор групповой скорости  $\mathbf{V}_g^{t_2}(\theta_g)$  будет параллелен направлению фокусировки — в данном случае направлению  $[001]$ , тогда  $\theta_g^{\lambda} = n\pi/2$  ( $n$  — целое) (см. рис. 1). В этом случае  $S_{\theta}^{\lambda}(\theta_g, 0) = 0$ . Для кристаллов Ge и Si углы  $\theta_1$  равны  $25.7$  и  $23.68^\circ$  соответственно. Угол  $\theta_g$  определяет направление групповой скорости в плоскости  $\{100\}$  (см. рис. 1). Характерными особенностями на изоэнергетической поверхности (поверхности медленности) являются линии нулевой кривизны, в которых происходит переход от выпуклых к вогнутым областям. Для сечения этой поверхности плоскостью грани куба  $\{100\}$  мы получаем точки нулевой кривизны, угол между которыми равен  $2\theta_2$  (см. рис. 1). Для кристаллов Ge и Si углы  $\theta_2$  равны  $12.2$  и  $12^\circ$  соответственно. В точках нулевой кривизны на поверхности медленности вектор групповой скорости фонона имеет максимальное отклонение от направления  $[100]$ , и этот угол мы обозначим как  $\theta_3 = \theta_g^{\lambda}(\theta_2) = 9.4$  и  $6.76^\circ$ , для кристаллов Ge и Si соответственно. Построив  $\mathbf{V}_g^{t_2}$  для углов  $-\theta_2 \leq \theta \leq \theta_2$ , мы определим угол „схождения“ групповых скоростей  $\theta_3$ , или, точнее, величину сектора, который определяет область фокусировки фононов в пространстве групповых скоростей  $-\theta_3 \leq \theta_g \leq \theta_3$ . Величину сектора волновых векторов, определяющего область фокусировки будут задавать групповые скорости, коллинеарные  $\mathbf{V}_g^{t_2}(\pm\theta_2)$  в точках нулевой кривизны. Поэтому фононы с волновыми векторами, принадлежащие сектору  $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$  будут распространяться в области фокусировки (рис. 2). В кристаллах Ge и Si углы  $\theta_4$  составляют  $31.4$  и  $28.6^\circ$

соответственно. В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают, поэтому фононы, распространяющиеся в изотропной среде в секторе  $-\theta_4 \leq \theta \leq \theta_4$ , в кристаллах Ge и Si будут распространяться в существенно меньшем секторе  $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$  (см. рис. 1). Поскольку  $\theta_4 > \theta_3$ , то плотность состояний для этой моды в направлениях фокусировки близких к  $[100]$  существенно возрастает по сравнению с изотропной средой. Аналогично можно показать, что продольные фононы фокусируются в направлении  $[111]$ , а быстрая поперечная мода — в направлении  $[110]$ . Следует отметить, что фокусировка фононов происходит в тех направлениях, где поверхность постоянной частоты принимает минимальные значения, а фазовая скорость — максимальные.

Предложенный нами метод анализа фокусировки медленной квазипоперечной моды позволяет сделать количественные оценки изменения углового распределения плотности фононных состояний в кристаллах Ge и Si. Для этого введем среднюю плотность фононных состояний моды  $t_2$  для волновых векторов в плоскости  $\{100\}$ , приходящуюся на единичный угол для областей фокусировки  $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$   $N_F^{t_2\{100\}}$  и изотропной среды  $N_{iso}$ . Поскольку расходящийся сектор волновых векторов для изотропной среды в плоскости  $\{100\}$  с углом  $2\theta_4$  превращается в расходящийся сектор векторов групповых скоростей фононов с углом  $2\theta_3$ , то средняя плотность состояний в областях фокусировки фононов будет больше, чем в изотропной среде  $N_F^{t_2\{100\}}/N_{iso} = 2\theta_4/2\theta_3 = 4.24$  и  $3.34$  для Si и Ge соответственно. Для области дефокусировки средняя плотность состояний  $N_D^{t_2\{100\}}$  будет меньше, чем  $N_{iso}$ . Для нее нетрудно получить  $N_D^{t_2\{100\}}/N_{iso} = (\pi - 4\theta_4)/(\pi - 4\theta_3) = 0.43$  и  $0.38$  для Si и Ge соответственно. Из этого следует, что средняя плотность состояний для волновых векторов в плоскости  $\{100\}$  в областях фокусировки будет больше, чем для областей дефокусировки в  $9.86$  и  $8.75$  раза для Si и Ge соответственно (см. рис. 2). Итак, значительная часть фононов моды  $t_2$  будет распространяться в направлениях близких к  $[100]$ . Этот эффект может оказать значительное влияние на фононный транспорт в упруго анизотропных кристаллах.

### 3. Длины свободного пробега фононов в монокристаллических пленках в режиме кнудсеновского течения фононного газа

Проанализируем влияние анизотропии упругой энергии на кнудсеновское течение фононного газа в пленках, когда теплосоппротивление обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. Эта проблема представляет интерес для анализа распространения фононных импульсов в пленках [11]. Для этого при температурах, гораздо меньших температуры Дебая ( $T \ll T_D$ ) предста-

вим теплопроводность в виде аддитивной суммы вкладов от всех колебательных ветвей (см. [26])

$$\kappa_{[l(\psi)]}^{\{J\}}(T) = (1/3)C_V(T)\bar{S}\Lambda_{[l(\psi)]}^{\{J\}} = \sum_{\lambda} \frac{1}{3}C_V^{\lambda}(T)\bar{S}^{\lambda}\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}. \quad (3)$$

Поскольку удельные теплоемкости  $C_V(T)$  и  $C_V^{\lambda}(T)$ , средние скорости фонона  $\bar{S}$  и  $\bar{S}^{\lambda}$  не зависят от направления потока тепла, то анизотропия теплопроводности и вкладов в нее от колебательных мод определяются длинами свободного пробега  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\{J\}}$  и  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$ . Для направления потока тепла  $[l(\psi)]$  и ориентации плоскости пленки  $\{J\}$  их можно представить в виде [24]

$$\begin{aligned} \Lambda_{[l(\psi)]}^{\{J\}} &= \tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{J\}} D \\ &= \frac{3}{4\pi} \frac{1}{\sum_{\lambda_1} \langle (S^{\lambda_1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int d\Omega_q \frac{I_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}, \\ \Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}} &= \tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}} D = \frac{3}{4\pi} \frac{1}{\langle (S^{\lambda})^{-2} \rangle} \int d\Omega_q \frac{I_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\lambda$  — индекс поляризации,  $d\Omega_q = \sin\theta d\theta d\varphi$ ,  $\theta \in [0, \pi]$ ,  $\varphi \in [0, 2\pi]$ ,  $\theta$  и  $\varphi$  — угловые переменные вектора  $\mathbf{q}$ . Индекс поляризации  $l$  соответствует продольным фононам, а  $t_1$  и  $t_2$  соответствуют „быстрой“ (верхней) и „медленной“ (нижней) поперечным колебательным модам. Релаксационные функции  $I_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)$  для пленок длины  $L$  с прямоугольным сечением  $DW$  ( $W = \mu D$ ) при выполнении неравенств  $\mu|V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|$  и  $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g1}^{\lambda}| \geq k_0 = L/2D$  или  $\mu|V_{g1}^{\lambda}| < |V_{g2}^{\lambda}|$  и  $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| \geq k_0/\mu$  определяются выражениями [24]

$$I_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \frac{Dk_0|V_{g3}^{\lambda}|}{\mu} \times \left\{ \mu - \frac{k_0}{2} \frac{(|V_{g2}^{\lambda}| + \mu|V_{g1}^{\lambda}|)}{|V_{g3}^{\lambda}|} + \frac{(k_0)^2}{3} \frac{|V_{g1}^{\lambda}||V_{g2}^{\lambda}|}{(V_{g3}^{\lambda})^2} \right\}. \quad (5)$$

Если  $\mu|V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|$  при  $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g1}^{\lambda}| < k_0$  или  $\mu|V_{g1}^{\lambda}| < |V_{g2}^{\lambda}|$  при  $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| < k_0/\mu$ , то функции  $I_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)$  определяются выражениями для образцов бесконечной длины

$$\begin{aligned} I_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) &= \frac{D}{6\mu} \left[ \left( \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}} \right)^2 \left( 3\mu|V_{g1}^{\lambda}| - |V_{g2}^{\lambda}| \right) \right], \\ &\quad \mu|V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|, \\ I_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) &= \mu \frac{D}{6} \left[ \left( \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g2}^{\lambda}} \right)^2 \left( 3|V_{g2}^{\lambda}| - \mu|V_{g1}^{\lambda}| \right) \right], \\ &\quad \mu|V_{g1}^{\lambda}| < |V_{g2}^{\lambda}|. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь  $V_{g3}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ ,  $V_{g1}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ ,  $V_{g2}^{\lambda}(\theta, \varphi)$  — проекции групповой скорости на направления градиента температуры, и

стороны  $D$  и  $W$  соответственно. Для образцов с квадратным сечением [23] достаточно в формулах (5), (6) положить  $\mu = 1$ .

В изотропных средах фазовые скорости фононов  $S^{\lambda}$  не зависят от углов  $\theta$  и  $\varphi$ . Поэтому длины пробега фононов различных поляризаций равны друг другу и средней длине пробега. Они не зависят от упругих модулей, а полностью определяются геометрическими параметрами образцов [24]

$$\Lambda^L = \Lambda^t = \Lambda = D \frac{3}{4\pi} \int d\Omega_q \tilde{I}(\theta, \varphi), \quad \tilde{I}(\theta, \varphi) = \frac{I^{\lambda}(\theta, \varphi)}{DS^{\lambda}}, \quad (7)$$

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = k_0|n_3| \left\{ 1 - \frac{k_0}{2\mu} \frac{|n_2| + \mu|n_1|}{|n_3|} + \frac{(k_0)^2}{3\mu} \frac{|n_1||n_2|}{(n_3)^2} \right\},$$

при

$$\left\{ \begin{array}{l} (\mu|n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3/n_1| \geq k_0) \text{ или} \\ (\mu|n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3/n_2| \geq k_0/\mu), \end{array} \right.$$

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = \left\{ \begin{array}{l} (n_3/n_1)^2 (3\mu|n_1| - |n_2|)/6\mu, \\ \quad \text{при } \mu|n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3/n_1| < k_0, \\ (n_3/n_2)^2 (3|n_2| - \mu|n_1|)\mu/6, \\ \quad \text{при } \mu|n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3/n_2| < k_0/\mu. \end{array} \right.$$

Здесь  $n_1$ ,  $n_2$  и  $n_3$  — компоненты единичного волнового вектора  $\mathbf{n}$ . Однако в упруго анизотропных кристаллах они различны для фононов разных поляризаций и зависят от направления теплового потока в кристалле. Из выражения (7) для диэлектрического стержня бесконечной длины следует результат Казимира [8]: длина свободного пробега равна его диаметру. В случае стержня бесконечной длины с прямоугольным сечением ( $D$  — толщина и  $W = \mu D$  — ширина) мы получаем результат Мак-Карди и др. [5] для длины Казимира

$$\begin{aligned} \Lambda_C = \frac{3D}{4} \left\{ \ln \left[ \mu + \sqrt{1 + \mu^2} \right] + \mu \ln \left[ \mu^{-1} + \sqrt{1 + \mu^2} \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{3} \left[ (\mu^{-1} + \mu^2) - \mu^{1/2}(\mu^{-1} + \mu)^{3/2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Из формулы (8) следует, что в модели изотропной среды длины Казимира для пленок логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности [6,22]

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda}_C(\mu) &= \Lambda_C(\mu)/D \cong A + B \ln \mu, \\ \mu \gg 1, \quad A &\approx 0.895, \quad B = 0.75, \end{aligned} \quad (9)$$

Как отмечалось в [6,22], логарифмическая расходимость (9) обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки.

#### 4. Влияние геометрических параметров пленок на анизотропию длин свободного пробега фононов

Проанализируем зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров, когда тепловой поток вращается в плоскости пленки для трех случаев: (1) плоскость пленки совпадает с плоскостью грани куба  $YZ\{J\} = \{100\}$ , (2) плоскость пленки совпадает с диагональной плоскостью  $\{J\} = \{110\}$ , (3) плоскость пленки перпендикулярна диагонали куба  $\{J\} = \{111\}$ . Ориентационные параметры  $[I(\psi)]$  и  $\{J\}$  для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные теплового потоку. Определим систему координат с осью „3“ вдоль направления теплового потока. Ось „1“ (ось вращения) направим перпендикулярно плоскости пленки, она определяет ориентацию плоскости  $\{J\}$ . Ось „2“ направим перпендикулярно двум узким боковым граням пленки. Тогда компоненты групповой скорости фононов для рассматриваемых случаев могут быть представлены в следующем виде [24]

$$(1) \quad V_{g3}^\lambda = -V_{gy}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\ V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda \cos \psi + V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda, \quad (10)$$

$$(2) \quad V_{g3}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\ V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \psi, \\ V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2}, \quad (11)$$

$$(3) \quad V_{g3}^\lambda = (V_{gx}^\lambda - V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} \\ + \sqrt{\frac{2}{3}} (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\ V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} \\ + \sqrt{\frac{2}{3}} (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda \sin \psi, \\ V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda + V_{gz}^\lambda) / \sqrt{3}. \quad (12)$$

Зависимость направления теплового потока от угла  $\psi$  определяется компонентой групповой скорости  $V_{g3}^\lambda$ . Проекция групповой скорости  $V_{g1}^\lambda$  не зависит от угла  $\psi$ , поскольку является осью вращения (см. формулы (10)–(12)).

Рассмотрим зависимость анизотропии длин свободного пробега фононов от геометрических параметров пленки. Ранее нами было установлено, что для образцов с квадратным сечением длины свободного пробега фононов достигают максимальных значений в направлениях фокусировки фононов, а минимальных значений —

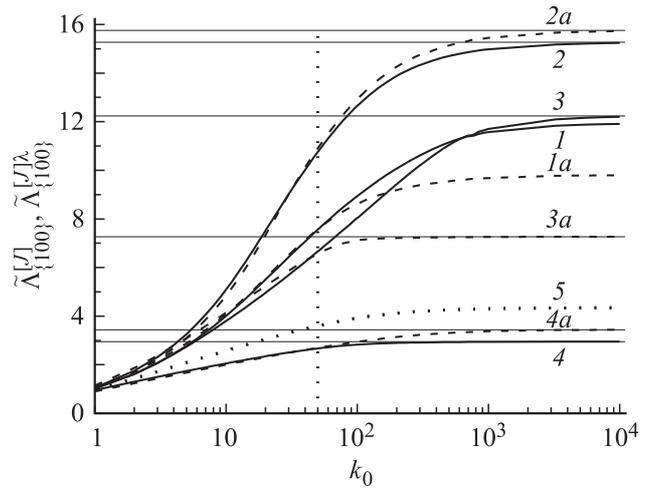
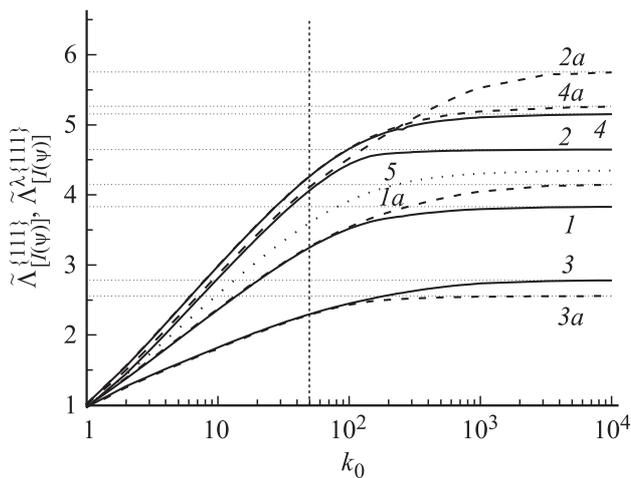


Рис. 3. Зависимости средних длин пробега  $\tilde{\Lambda}_J^{\{100\}}(k_0)$  (кривые 1 и 1a), а также  $\tilde{\Lambda}_J^{\{100\}}(k_0)$  в пленках германия с ориентацией  $\{100\}$  от приведенной длины  $k_0$ . Сплошные кривые (1, 2, 3, 4) рассчитаны для градиента температуры вдоль  $[100]$ . Штриховые кривые (1a, 2a, 3a, 4a) рассчитаны для градиента температуры вдоль  $[110]$ . Кривые (2, 2a) — для моды  $t_1$ , (3, 3a) — для моды  $t_2$ , (4, 4a) — для продольных фононов, кривая 5 — для модели изотропной среды.

в направлениях дефокусировки [25]. Поэтому построим зависимости длин пробега для пленок Ge шириной  $W = 100D$  от приведенной длины  $k_0 = L/2D$  в направлениях теплового потока обеспечивающих фокусировку и дефокусировку различных мод. Так, например, для медленной поперечной моды в пленках с ориентацией плоскости  $\{100\}$  этими направлениями являются  $[100]$  и  $[110]$ . Продольная мода в направлении  $[100]$  дефокусируется, а в направлении  $[110]$  имеет место локальный максимум фокусировки [25]. Если в какой-то области геометрических параметров длины свободного пробега для этих направлений будут совпадать, то можно ожидать, что в этой области их зависимости в плоскости пленки будут изотропны. Если они будут различаться, то их зависимости в плоскости пленки будут анизотропны. Как видно из рис. 3, зависимости средних, а также длин пробега для фононов различных поляризаций в пленках германия с ориентацией  $\{100\}$  являются возрастающими функциями длины образца. При  $L \leq W$  для направлений градиента температур  $[100]$  и  $[110]$  их зависимости практически совпадают. Поэтому, следует ожидать, что при  $L \leq W$  угловые зависимости длин пробега в плоскости пленок с ориентацией  $\{100\}$  будут изотропны. Однако при  $k_0 > 100$  увеличение длины образца приводит к возрастанию анизотропии длин свободного пробега.

При  $L \gg W$  эти зависимости насыщаются, и длины пробега  $\Lambda_{[100]}^{t2\{100\}}$  в направлении фокусировки  $[100]$  превосходит  $\Lambda_{[110]}^{t2\{100\}}$  для направления дефокусировки в 1.7 раза. Для быстрых поперечных и продольных фононов анизотропия длин пробега в области насы-



**Рис. 4.** Зависимости длин пробега  $\tilde{\Lambda}_J^{\{111\}}(k_0)$  (кривые 1 и 1а), а также  $\tilde{\Lambda}_J^{\{111\}}(k_0)$  в пленках германия с ориентацией  $\{111\}$  от приведенной длины  $k_0$ . Сплошные кривые (1, 2, 3, 4) рассчитаны для градиента температур в направлении  $[11\bar{2}]$  ( $\psi = 0$ ). Штриховые кривые (1а, 2а, 3а, 4а) рассчитаны для градиента температур в направлении  $[110]$  ( $\psi = \pi/2$ ). Кривые (2, 2а) — для моды  $t_1$ , (3, 3а) — для моды  $t_2$ , (4, 4а) — для продольных фононов, кривая 5 — для модели изотропной среды.

шения значительно меньше:  $\Lambda_{[110]}^{t2\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{t2\{100\}} = 1.03$  и  $\Lambda_{[110]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{L\{100\}} = 1.16$ . Для пленок кремния и алмаза длины пробега ведут себя аналогично случаю германия. При  $L \leq W$  их зависимости для направлений фокусировки и дефокусировки практически совпадают. А в области насыщения  $L > 20W$  анизотропия длин пробега для пленок алмаза оказывается существенно меньше, чем для пленок германия и кремния за счет меньшего значения параметра анизотропии. Численный анализ показал, что для пленок Si и алмаза  $\Lambda_{[110]}^{t2\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{t2\{100\}} = 1.14$  и  $1.01$ , и  $\Lambda_{[110]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{L\{100\}} = 1.62$  и  $1.24$  соответственно.

Аналогичным образом ведут себя длины свободного пробега и в пленках германия с плоскостью  $\{111\}$  и направлением потока тепла в  $[11\bar{2}]$  и  $[110]$  (рис. 4). В направлении  $[110]$  фокусируется быстрая поперечная мода и имеет место локальный максимум для продольных фононов. Направление  $[11\bar{2}]$  соответствует дефокусировке быстрой поперечной моды и продольных фононов и локальному максимуму фокусировки для медленной поперечной моды. Поэтому величины длин свободного пробега для  $t_1$  и  $L$  фононов в области насыщения  $L \gg W$  в направлении  $[110]$  оказываются больше, чем для направления  $[11\bar{2}]$  соответственно, тогда как для моды  $t_2$  ситуация обратная (см. рис. 4). Соответственно для пленок Ge имеем  $\Lambda_{[110]}^{t1\{111\}} : \Lambda_{[112]}^{t1\{111\}} = 1.24$  и  $\Lambda_{[110]}^{L\{111\}} : \Lambda_{[112]}^{L\{111\}} = 1.02$  и  $\Lambda_{[110]}^{t2\{111\}} : \Lambda_{[112]}^{t2\{111\}} = 0.92$ . Следует отметить, что длины пробега  $\Lambda_{[110]}^{t1\{111\}}$  и  $\Lambda_{[110]}^{L\{111\}}$  в направлении  $[110]$  превосходят значения, рассчитанные в модели изотропной среды в 1.34 и 1.19 раза соответ-

ственно. А в направлении  $[11\bar{2}]$  длина пробега  $\Lambda_{[112]}^{t2\{111\}}$  оказывается меньше в 1.56 раза, чем  $\Lambda_{iso}$ . Отметим, что при  $L < W$  зависимости  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(k_0)$ , а также  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{L\{111\}}(k_0)$  совпадают для обоих направлений. Поэтому для пленок  $L \leq W$  с плоскостями  $\{100\}$  и  $\{111\}$  можно ожидать, что угловые зависимости длин свободного пробега будут изотропны.

## 5. Анизотропия длин свободного пробега фононных мод в пленках Ge, Si и алмаза

Для анализа влияния геометрических параметров на анизотропию фононного транспорта в пленках рассмотрим угловые зависимости длин свободного пробега фононов для двух случаев: (а) длина пленки совпадает с ее шириной  $L = W$ , (б) длина пленки существенно больше ее ширины  $L = 2000W$ . Как видно из рис. 5, а, с, в случае  $(L = W)$  для пленок Ge ( $\mu = 100$ ) с ориентацией плоскостей  $\{100\}$  и  $\{111\}$  длины пробега фононов всех колебательных мод и полная теплопроводность изотропны, тогда как для плоскости  $J = \{110\}$  их зависимости анизотропны.

Как уже отмечалось, длины пробега фононов различных поляризаций в модели изотропной среды не зависят от упругих модулей, а полностью определяются геометрическими параметрами образцов. Поэтому при изменении направления теплового потока или ориентации плоскости пленки в упруго анизотропных пленках мы будем использовать модель изотропной среды в качестве системы сравнения для длин пробега.

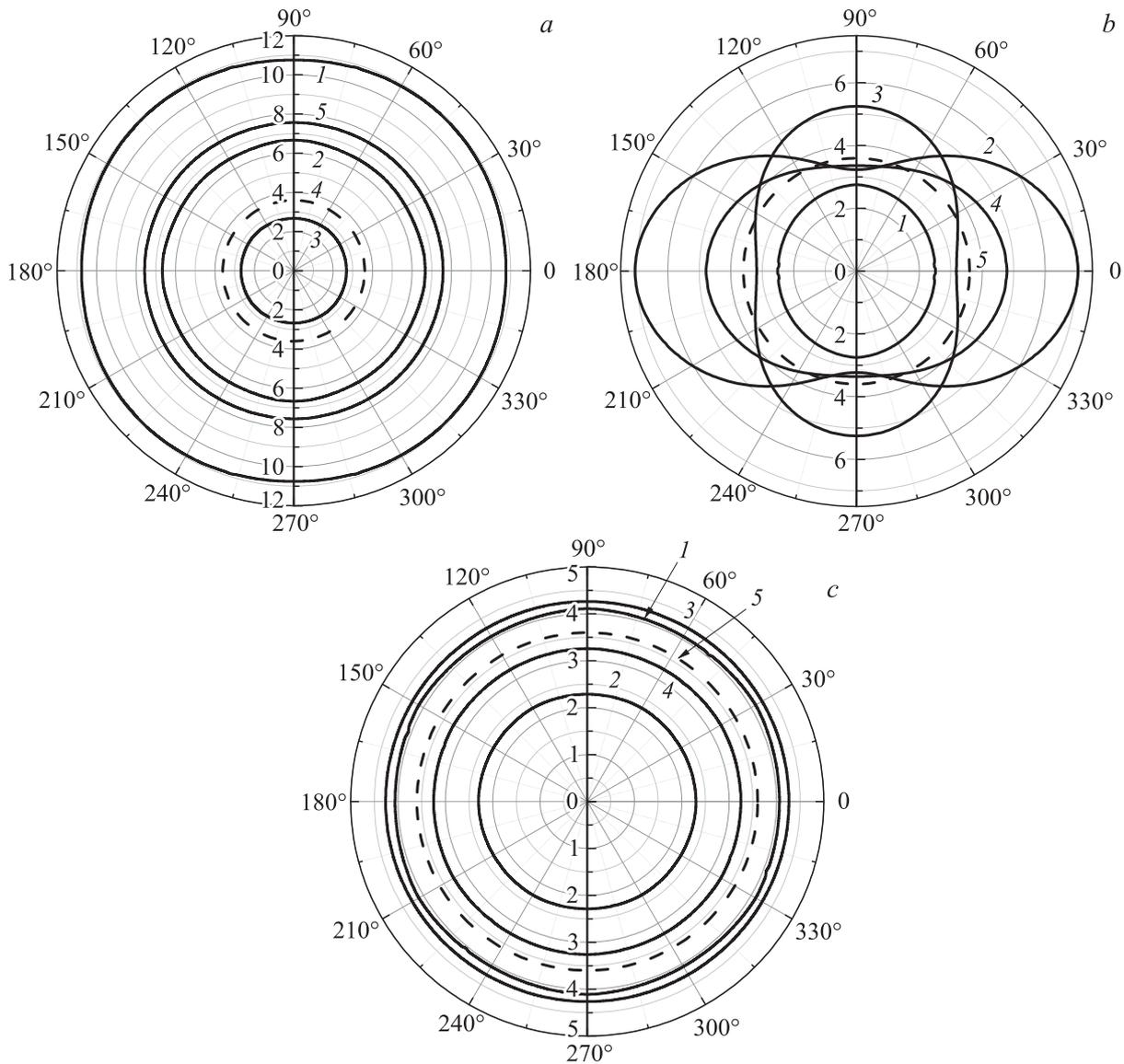
Для квадратных пленок Ge, Si и алмаза с ориентацией  $\{100\}$  максимальную длину свободного пробега имеют быстрые поперечные фононы, а минимальную продольные. Расчет длин пробега для фононов различных поляризаций в пленках Ge, Si и алмаза показывает, что для поперечных фононов они оказываются больше, а для продольных — меньше, чем в модели изотропной среды:

$$\Lambda_{[I(\psi)]}^{t1\{100\}} : \Lambda_{[I(\psi)]}^{t2\{100\}} : \Lambda_{[I(\psi)]}^{L\{100\}} : \Lambda_{iso} = 3.00 : 1.85 : 0.74 : 1,$$

$$\Lambda_{[I(\psi)]}^{t1\{100\}} : \Lambda_{[I(\psi)]}^{t2\{100\}} : \Lambda_{[I(\psi)]}^{L\{100\}} : \Lambda_{iso} = 3.46 : 1.84 : 0.77 : 1,$$

$$\Lambda_{[I(\psi)]}^{t1\{100\}} : \Lambda_{[I(\psi)]}^{t2\{100\}} : \Lambda_{[I(\psi)]}^{L\{100\}} : \Lambda_{iso} = 1.48 : 1.23 : 0.85 : 1$$

соответственно. Следует отметить, что теплопроводность и средние длины свободного пробега для пленок Ge, Si и алмаза при переходе от ориентации  $\{100\}$  к  $\{111\}$  уменьшаются в 2.33, 2.52 и 1.32 раза соответственно. Для пленок Ge  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{L\{J\}}$  увеличивается в 1.6 раза, и принимает максимальное значение, а  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{t1\{J\}}$  и  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{t2\{J\}}$  уменьшаются в 2.7 и 2.9 раза соответственно. При этом максимальное значение  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{L\{111\}}$  становится больше в 1.18 раза, чем  $\Lambda_{iso}$ . Значения длин свободного пробега для быстрых поперечных фононов в пленках Ge

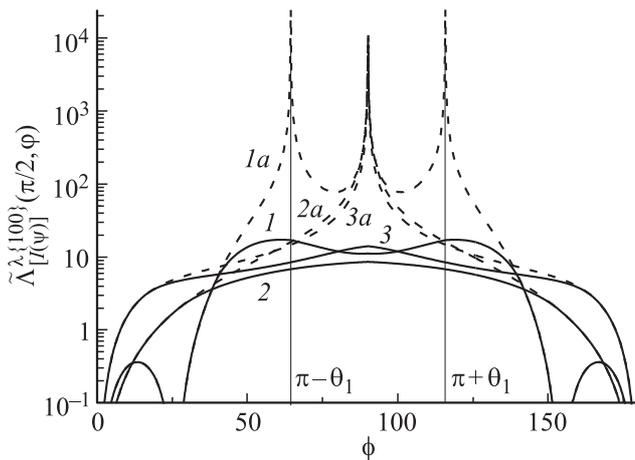


**Рис. 5.** Угловые зависимости длин свободного пробега фононов  $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}/D$  и  $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\{J\}}/D$ , нормированных на толщину пленки  $D$ , для нанопленок Ge длиной  $L = W$  и приведенной шириной  $\mu = 100$ , когда градиент температур вращается в плоскости пленки  $\{100\}$  — (a),  $\{110\}$  — (b) и  $\{111\}$  — (c). Кривые 1 — для быстрой поперечной моды, 2 — для медленной поперечной моды, 3 — для продольной моды, 4 — для средней длины свободного пробега, 5 — для модели изотропной среды.

превосходят рассчитанные в модели изотропной среды в 1.13. В противоположность пленкам с ориентацией  $\{100\}$  средняя длина пробега, а также  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{t2\{111\}}$  в пленках Ge оказывается меньше, чем в модели изотропной среды:  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\{111\}} : \Lambda_{[l(\psi)]}^{t2\{111\}} : \Lambda_{\text{iso}} = 0.90 : 0.64 : 1$ . Для пленок Si и алмаза анизотропия длин пробега качественно подобна пленкам Ge:  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{t1\{111\}} : \Lambda_{[l(\psi)]}^{t2\{111\}} : \Lambda_{[l(\psi)]}^{L\{111\}} : \Lambda_{\text{iso}} = 1.1 : 0.65 : 1.2 : 1$  для Si и  $1.07 : 0.79 : 1.10 : 1$  для алмаза.

Для плоскости  $J = \{110\}$  зависимости теплопроводности и  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\{110\}}$  имеют эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления  $[100]$ . Из рис. 5, b видно, что эта зависимость обусловлена фокусировкой и дефокусировкой моды  $t_2$ . В пленках с плоскостью  $J = \{110\}$  эта мода

фокусируется в направлениях  $[100]$ , поэтому  $\Lambda_{[100]}^{t2\{110\}}$  принимает максимальное значение и превосходит  $\Lambda_{\text{iso}}$  в 1.96, 2.12 и 2.44 раза в пленках Ge, Si и алмаза соответственно. В противоположность этому для Ge, Si в направлении  $[110]$  мода  $t_2$  дефокусируется и ее длина пробега принимает минимальные значения, меньшие, чем  $\Lambda_{\text{iso}}$ : отношение  $\Lambda_{[110]}^{t2\{100\}}/\Lambda_{\text{iso}}$  составляет 0.9 и 0.93 соответственно. Для продольных фононов в направлении  $[110]$  длина пробега достигает максимума: ее значения для Ge превышают в 1.5 раза, а в направлении  $[100]$  она имеет минимум: ее значение на 10% меньше, чем  $\Lambda_{\text{iso}}$ . Зависимость  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{t1\{110\}}$  почти изотропна и для всех направлений заметно меньше, чем  $\Lambda_{\text{iso}}$ .



**Рис. 6.** Зависимость длин свободного пробега  $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\lambda\{100\}}(\pi/2, \varphi)$  для пленок германия с осью  $[010]$ , длиной  $L = W$  (кривые 1, 2, 3) и  $L = 2000W$  (штриховые кривые 1a, 2a, 3a). Кривые 1, 1a — для медленной поперечной моды, кривые 2, 2a — для быстрой поперечной моды, кривые 3, 3a — для продольной моды.

Одной из задач нашей работы является выяснение физических причин, почему длины пробега фононов в квадратных пленках ( $L = W$ ) с ориентациями плоскостей  $\{100\}$  и  $\{111\}$  являются изотропными, а в случае  $\{110\}$  они становятся анизотропными (рис. 5). Для объяснения этих эффектов проанализируем влияние фокусировки на распространение фононов в пленках. Как было отмечено ранее в работах [6,22] основной вклад в фоновый транспорт вносят фононы, распространяющиеся в направлениях, близких к плоскости пленки. Поэтому возьмем пленку с ориентацией плоскости  $\{001\}$ , зафиксируем  $\theta = \pi/2$ , что соответствует направлению потока тепла в плоскости пленки, и построим зависимости  $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\lambda\{100\}}(\pi/2, \varphi)$  для двух случаев: (а) длина совпадает с шириной  $L = W$  (сплошные кривые рис. 6), (б) длина существенно больше ширины пленки  $L = 2000W$  (штриховые кривые рис. 6). Как видно из рисунка для пленок с  $L = W$  зависимости  $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\lambda\{100\}}(\pi/2, \varphi)$  имеют вид широких пьедесталов, с интервалами углов, которые дают основной вклад в длины свободного пробега, превышающими  $\pi/2$  для всех мод. С другой стороны, медленная поперечная мода в плоскости грани куба фокусируется в  $[001]$ , а в направлении  $[110]$  — дефокусируется. Угол между этими направлениями составляет  $\pi/4$ . Продольные фононы имеют локальную фокусировку в направлении  $[110]$ , а в направлении  $[001]$  — дефокусируются. Угол между ними также составляет  $\pi/4$ . Поскольку для квадратных пленок область усреднения захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов, то угловые зависимости длин пробега после усреднения по углам становятся практически изотропными.

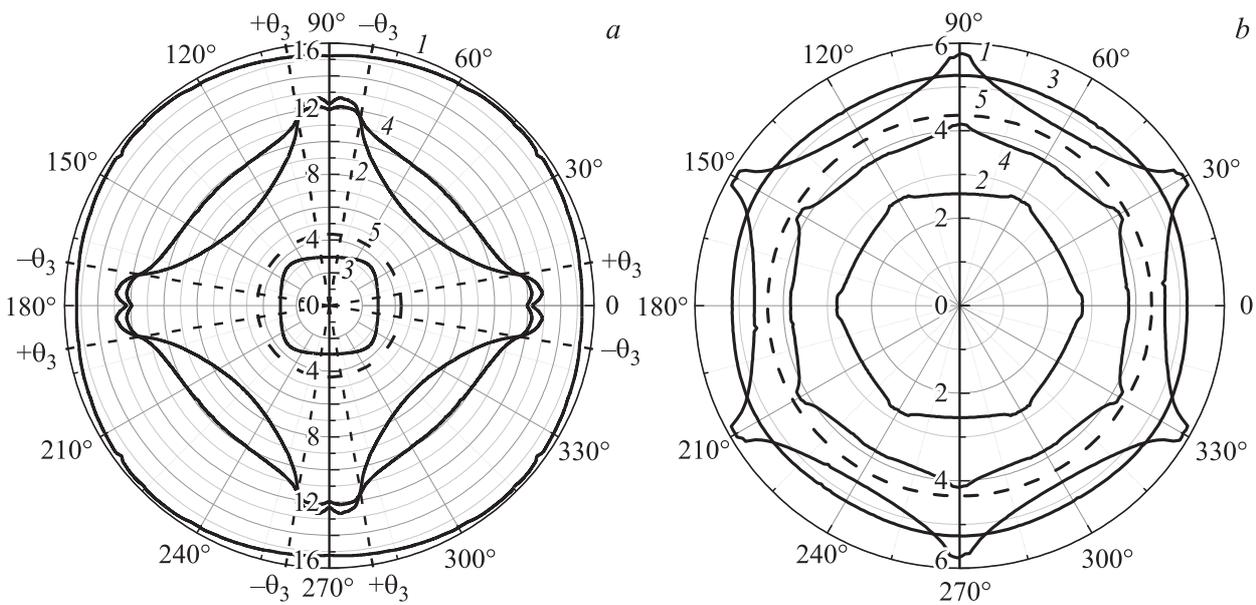
Аналогичная ситуация реализуется для плоскости  $\{111\}$  угол между направлениями фокусировки и де-

фокусировки составляет  $\pi/6$ . Так быстрая поперечная мода фокусируется при углах  $\varphi = \pi/6 + n\pi/3$ , а при углах  $\varphi = n\pi/3$  имеет локальную дефокусировку. Напротив, медленная поперечная мода в этой плоскости дефокусируется в направлениях  $\varphi = \pi/6 + n\pi/3$  и имеет локальную фокусировку в направлениях  $n\pi/3$ . Спектр продольных фононов в данной плоскости практически изотропный, а фазовая скорость принимает максимальные значения. Область усреднения в плоскости пленки в этом случае захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому угловые зависимости длин пробега становятся изотропными.

Как уже отмечалось анизотропия теплопроводности пленок с плоскостью  $J = \{110\}$  обусловлена фокусировкой медленной поперечной моды  $t_2$ . Для пленок с ориентацией  $\{110\}$  угол между направлениями фокусировки и дефокусировки для медленной поперечной моды составляет  $\Delta\varphi = 90^\circ$ , что в 2 и 3 раза больше, чем для пленок с ориентациями  $\{100\}$  и  $\{111\}$  соответственно. В связи с этим при усреднении по углам в плоскости пленки  $\{110\}$  для произвольного направления градиента температур оба направления не могут быть одновременно охвачены, и угловая зависимость  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{t_2\{110\}}$  остается анизотропной. Она принимает эллипсоидальный вид с длинной осью в  $[100]$  и минимумом вдоль  $[100]$  (рис. 5, b). Продольная мода в пленках с ориентацией  $\{110\}$  фокусируется и дефокусируется в направлениях  $[110]$  и  $[100]$  соответственно. Угловая зависимость для нее принимает эллипсоидальный вид с длинной осью в  $[110]$  (рис. 5, b).

С увеличением длины пленки интервал углов, дающий основной вклад в длины свободного пробега, значительно сужается (см. рис. 6). Поэтому при переходе к длинным пленкам  $L \gg W$  усреднение по углам  $\varphi$  в плоскости пленки оказывается уже недостаточным, чтобы полностью размыть эффект фокусировки фононов. Поэтому длины пробега в пленках с ориентациями  $\{100\}$  и  $\{111\}$  становятся анизотропными.

При переходе к случаю пленки с длиной, существенно большей ее ширины (рис. 7), угловые зависимости длин свободного пробега становятся анизотропными. Исключением здесь являются быстрые поперечные фононы. Анизотропия длин пробега для них мала, поскольку фазовая скорость в плоскости  $\{100\}$  изотропна (см. рис. 1 в работах [2,27]). Наиболее анизотропной является длина пробега для медленных поперечных фононов в пленках с ориентацией  $\{100\}$ . Как видно из рис. 7, a, угловая зависимость  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{t_2\{100\}}$  в окрестности направления  $[100]$  хорошо коррелирует с угловой зависимостью плотности фоновых состояний с учетом фокусировки фононов. Области максимальных значений длина пробега  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{t_2\{100\}}$  в окрестности направлений типа  $[100]$  ограничена углами  $-\theta_3 + n\pi/2 \leq \theta \leq \theta_3 + n\pi/2$ , определяющими область фокусировки фононов (рис. 1 и 2). Наличие небольшого локального минимума в направлении  $[100]$  и максимума при углах  $4$  и  $3^\circ$  для Ge и Si соответственно



**Рис. 7.** Угловые зависимости длин свободного пробега фононов  $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}/D$  и  $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\{J\}}/D$ , нормированных на толщину пленки  $D$ , для Ge нанопленок длиной  $L = 2000 W$  и приведенной шириной  $\mu = 100$ , когда градиент температур вращается в плоскости пленки (а) —  $\{100\}$  и (б) —  $\{111\}$ . Кривые 1 — для быстрой поперечной моды, 2 — для медленной поперечной моды, 3 — для продольной моды, 4 — для средней длины свободного пробега, 5 — для модели изотропной среды.

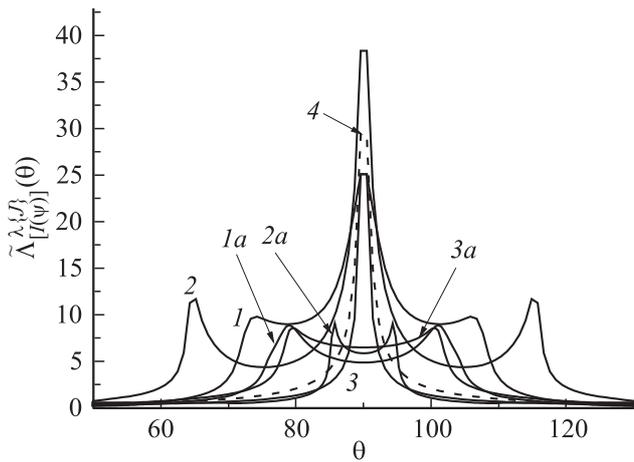
связано с тонкими особенностями фокусировки моды  $t_2$  и обусловлено переходом от областей с положительной к отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности.

Для пленок алмаза в отличие от Ge и Si отсутствуют области с отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности, поэтому в направлении  $[100]$  длина свободного пробега моды  $t_2$  достигает максимального значения. Для продольных фононов максимальные значения длины пробега достигают в  $[110]$ , а минимальные — в  $[100]$ . Отношения этих значений для кристаллов Ge, Si и алмаза равны  $\Lambda_{[100]}^{L\{100\}} : \Lambda_{[110]}^{L\{100\}} = 1.17, 1.14$  и 1.08 соответственно. Следует отметить, что, как для квадратных пленок ( $L = W$ ), так и для случая длинных пленок  $L \gg W$ , длины свободного пробега быстрых и медленных поперечных фононов для этих кристаллов превосходят значения  $\Lambda_{\text{iso}}$ , а для продольных фононов они меньше, чем  $\Lambda_{\text{iso}}$ .

Исследуем физические причины, приводящие к тому, что теплопроводность и средние длины свободного пробега в пленках с ориентацией  $\{100\}$ , больше чем с ориентацией  $\{111\}$ . Рассмотрим зависимости длин пробега в сечении, перпендикулярном плоскости пленки проходящем через ее ось. Как видно из рис. 8 (кривая 4), для изотропной среды имеет центральный пик соответствующий фононам, распространяющимся в плоскости пленки. В упруго анизотропной среде для поперечных фононов угловые зависимости длин пробега меняются. Для быстрых поперечных фононов около центрального максимума появляется пьедестал, а для моды  $t_2$  появляются дополнительные пики, смещенные

от центрального на угол  $\pm\theta_1$ . Как уже было отмечено выше, для этих пиков групповая скорость фононов будет направлена в  $[001]$ . Поэтому при переходе в координатное пространство эти пики перейдут в центральный максимум. Поэтому в кубических кристаллах, как и в изотропных средах, основной вклад в фононный транспорт дадут фононы центрального максимума. Причем, ширина его будет определяться не геометрическими параметрами пленки, как в изотропных средах, а углами  $2\theta_3$ , которые зависят от анизотропии упругой энергии.

Следует отметить, что для пленок с  $L = W$  угловые зависимости  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\{100\}}(\theta)$  не зависят от направления теплового потока, т.е. для достаточно широких пленок в этой плоскости вклад в длину свободного пробега вносят фононы в достаточно широком интервале углов в плоскости пленки. Поскольку для пленки с плоскостью  $\{100\}$  быстрые поперечные фононы фокусируются к направлению градиента температур, для них длины свободного пробега принимают максимальные значения. Медленная поперечная мода фокусируется в направлении  $[001]$ , для сечения, проведенного через направление  $[110]$ , она будет дефокусироваться, т.е. фононы будут отклоняться от направления градиента температур к плоскости пленки. Поэтому длина свободного пробега после усреднения будет меньше чем для моды  $t_1$ . Следует обратить внимание, что направление  $[100]$  соответствует направлению дефокусировки продольных фононов, поэтому во всей области углов величины длин пробега для продольных фононов оказались меньше, чем для изотропной среды (рис. 8).



**Рис. 8.** Зависимость длин свободного пробега  $\bar{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda\{100\}}(\theta)$  для пленок германия длиной  $L = W$  (кривые 1, 2, 3) и  $L = 1000W$  (кривые 1a, 2a, 3a). Кривые 1, 1a — для медленной поперечной моды, кривые 2, 2a — для быстрой поперечной моды, кривые 3, 3a — для продольной моды, кривая 4 — расчет для модели изотропной среды.

Для пленок с ориентацией плоскости  $\{111\}$  зависимости длин пробега  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}(\theta)$  существенно изменяются: центральный максимум сохраняется только для изотропной среды  $\Lambda_{\text{iso}}(\theta)$ , а для всех мод  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}(\theta)$  в пленках Ge и Si в окрестности направления теплового потока (оси пленки) имеют плавные минимумы (рис. 8). Это означает, что для всех мод в направлениях, близких к направлению теплового потока, преобладают эффекты дефокусировки, в отличие от пленок с ориентацией  $\{100\}$  пленки. Причем, длины пробега  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}(\theta)$  почти во всем интервале углов  $\theta$  оказываются меньше, чем  $\Lambda_{\text{iso}}(\theta)$ , за исключением узких интервалов, где они имеют локальные максимумы. Очевидно, что среднее значение  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}$  будет меньше, чем  $\Lambda_{\text{iso}}$ . Для быстрой поперечной и продольной мод интервалы углов  $\theta$ , где  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}(\theta) > \Lambda_{\text{iso}}(\theta)$  значительно шире, поэтому средние значения для них будут больше, чем  $\Lambda_{\text{iso}}$  (рис. 5). Как уже отмечалось, вклад продольных фононов в теплопроводность и средние длины пробега в пленках для рассматриваемых материалов мал по сравнению с вкладом поперечных фононов. Поскольку длины пробега обеих поперечных мод в пленках с ориентациями  $\{100\}$  значительно превышают  $\Lambda_{\text{iso}}$ , а в пленках с ориентациями  $\{111\}$  длина пробега  $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}} < \Lambda_{\text{iso}}$ , то в квадратных пленках с ориентацией  $\{100\}$  теплопроводность и средние длины пробега фононов имеют большие значения, чем для пленок с ориентацией  $\{111\}$ . Этот результат обусловлен главным образом тем, что для медленной поперечной моды в пленках с ориентацией  $\{100\}$  преобладают эффекты фокусировки, тогда как в пленках с ориентацией  $\{111\}$  — эффекты дефокусировки фононов.

## 6. Заключение

Рассмотрено влияние анизотропии упругой энергии на фоновый транспорт в монокристаллических пленках Ge, Si, алмаза при диффузном рассеянии фононов на границах. Проанализированы зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров, а также от направлений теплового потока и ориентации боковых граней наноструктур.

Показано, что изотропный характер средних длин свободного пробега, а также длин пробега для фононов различных поляризаций в достаточно широких пленках с ориентациями плоскостей  $\{100\}$  и  $\{111\}$  обусловлены особенностями фокусировки фононов в пленках с шириной, большей или равной ее длине. В этом случае в пленках с ориентациями плоскостей  $\{100\}$  и  $\{111\}$  область усреднения длин пробега в плоскости пленок захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов, они становятся изотропными. В пленках с ориентацией  $\{110\}$  угол между направлениями фокусировки и дефокусировки увеличивается в 2 раза по сравнению с пленками с ориентациями плоскостей  $\{100\}$ . В связи с этим при усреднении по углам в плоскости пленки  $\{110\}$ , оба направления не могут быть одновременно охвачены. Поэтому угловые зависимости длин свободного пробега становятся анизотропными. Увеличение длин пленки с ориентациями плоскостей  $\{100\}$  и  $\{111\}$  приводит к уменьшению области усреднения в плоскости пленки, и длины свободного пробега становятся анизотропными.

Детально проанализированы физические причины, приводящие к уменьшению полной теплопроводности и средней длины свободного пробега при переходе от квадратных пленок с ориентацией  $\{100\}$  к  $\{111\}$ . Этот результат обусловлен главным образом тем, что для медленной поперечной моды в пленках с ориентацией  $\{100\}$  преобладают эффекты фокусировки, тогда как в пленках с ориентацией  $\{111\}$  — эффекты дефокусировки фононов, которые приводят к значительному уменьшению ее длины пробега. В связи с этим полная теплопроводность и средняя длина свободного пробега уменьшаются в два с лишним раза при переходе от пленки с плоскостью  $\{100\}$  к  $\{111\}$ .

## Список литературы

- [1] D.G. Cahill, W.K. Ford, K.E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin, S.R. Phillpot. *J. Appl. Phys.* **93**, 793 (2003).
- [2] A.D. McConnell, K.E. Goodson. *Ann. Rev. Heat Trans.* **14**, 128 (2005).
- [3] D.G. Cahill, P.V. Braun, G. Chen, D.R. Clarke, S. Fan, K.E. Goodson, P. Keblinski, W.P. King, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, S.R. Phillpot, E. Pop, L. Shi. *Appl. Phys. Rev.* **1**, 011 305 (2014).
- [4] D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi, P. Yang, A. Majumdar. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2934 (2003).

- [5] A.K. McCurdy, H.J. Maris, C. Erlbaum. *Phys. Rev. B* **2**, 4077 (1970).
- [6] H.J. Maris, S. Tamura. *Phys. Rev. B* **85**, 054304 (2012).
- [7] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев. *ЖЭТФ* **145**, 292 (2014).
- [8] H.B.G. Casimir. *Physica* **5**, 495 (1938).
- [9] B. Taylor, H.J. Maris, C. Erlbaum. *Phys. Rev. Letters* **23**, 416 (1969).
- [10] H.J. Maris, *J. Acoust. Soc. Am.* **50**, 812 (1971).
- [11] J.P. Wolfe. *Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids*. Cambridge University Press, N.Y. (1998).
- [12] Дж. Займан. *Электронны и фононы*. ИЛ, М. (1962). 488 с.
- [13] Б.М. Могилевский, А.Ф. Чудновский. *Теплопроводность полупроводников*. Наука, М. (1972). 536 с.
- [14] W. Liu, M. Asheghi. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3819 (2004).
- [15] M. Asheghi, M.N. Touzelbaev, K.E. Goodson, Y.K. Leung, S.S. Wong. *J. Heat Trans.* **120**, 30 (1998).
- [16] M. Asheghi, Y.K. Leung, S.S. Wong, K.E. Goodson. *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1798 (1997).
- [17] Y.F. Zhu, J.S. Lian, Q. Jiang. *Appl. Phys. Lett.* **92**, 113101 (2008).
- [18] J.E. Turney, A.J.H. McGaughey, C.H. Amon. *J. Appl. Phys.* **107**, 024317 (2010).
- [19] Z. Aksamija, I. Knezevic. *Phys. Rev. B* **82**, 045319 (2010).
- [20] K. Fuchs. *Math. Proc. Cambridge Phil. Soc.* **34**, 100 (1938).
- [21] E.H. Sondheimer. *Adv. Phys.* **1**, 1 (1952).
- [22] M.P. Zaitlin, L.M. Scherr, A.C. Anderson. *Phys. Rev. B* **12**, 4487 (1975).
- [23] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С.М. Бахарев, А.В. Инюшкин. *Physica B* **416**, 81 (2013).
- [24] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев. *ЖЭТФ* **146**, 525 (2014).
- [25] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С.М. Бахарев, А.В. Инюшкин. *ФТТ* **55**, 24 (2013).
- [26] N. Mingo. *Phys. Rev. B* **68**, 113308 (2003).
- [27] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. *ФТТ* **49**, 422 (2007).