

03.10.19

Влияние фокусировки на распространение фононов и теплопроводность в монокристаллических пленках с различным типом анизотропии упругой энергии

© И.И. Кулеев

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

E-mail: kuleyev11@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 15 марта 2017 г.
В окончательной редакции 29 ноября 2017 г.)

Исследовано влияние анизотропии упругой энергии на распространение фононов и фононный транспорт в монокристаллических нанопленках с различным типом анизотропии упругой энергии в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Проанализировано распределение длин пробега фононов по углам в плоскостях пленок и в поперечном сечении. Изучены физические причины, приводящие к зависимости теплопроводности от ориентации плоскостей пленок и направлений потока тепла относительно осей кристалла. Анализ влияния фокусировки на распространение фононов позволил объяснить качественное отличие анизотропии длин пробега фононов в пленках из кубических нанокристаллов различного типа, имеющих разную ориентацию плоскостей.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема „Спин“ № 01201463330).

DOI: 10.21883/FIT.2018.05.45779.077

1. Введение

Интерес к исследованию фононного транспорта в нанопленках связан с широким использованием их в микроэлектронике [1–5]. Рассеяние фононов на границах пленок играет важную роль в теплосопротивлении в интервале температур от гелиевых до комнатных [6–8]. Экспериментальные исследования теплопроводности кремниевых нанопроводов диаметром от 22 до 115 nm были проведены в работе [1], и в кремниевых пленках с толщинами от 20 до 1600 nm в работах [2–4]. Эти данные по теплопроводности пленок и нанопроводов интерпретировались в модели изотропной среды. При изложении экспериментальных результатов в работах [1–4] не учитывались эффекты, обусловленные фокусировкой фононов: не указывались ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей (см. также обзор [5]). Это приводило к погрешности 1.7 раз для кремниевых нанопроводов и в 2.5 раза для теплопроводности кремниевых пленок, поскольку не учитывалась зависимость теплопроводности от направления потока тепла в нанопроводах и от ориентаций плоскостей пленок (см. работы [7–8]). В [7–8] было показано, что граничное рассеяние фононов вносит существенный вклад в теплопроводность достаточно тонких пленок даже при комнатных температурах (согласно [8], более 50%).

В настоящей работе проанализируем влияние анизотропии упругой энергии на распространение и рассеяние фононов в монокристаллических пленках из кубических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии в режиме граничного рассеяния.

В работе [9] показано, что влияние анизотропии упругой энергии на спектр и вектора поляризации колебательных мод определяется безразмерным параметром $k-1 = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11}) / (c_{11} - c_{44})$ (c_{ij} — упругие модули второго порядка). В зависимости от знака параметра $k-1$, согласно [9], все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной $k-1 > 0$ (LiF, GaSb, GaAs и GaN) и отрицательной $k-1 < 0$ (CaF₂, SrF₂) анизотропией упругих модулей второго порядка (см. табл. 1). Значения упругих модулей второго порядка взяты из работ [10–14]. Для изотропных сред параметр $k-1 = 0$. Проведенный в работе [10] анализ показал, что направления фокусировки колебательных мод в кристаллах первого типа соответствуют направлениям дефокусировки в кристаллах второго типа [10].

Особенности фононного транспорта в наноструктурах в режиме граничного рассеяния рассматривались в работах [10,16]. В [10], главным образом, анализиро-

Таблица 1. Упругие модули второго порядка c_{ij} (10^{12} дин/см²), плотность ρ (г/см³) и параметр анизотропии $k-1$ для рассматриваемых кубических кристаллов. (Данные взяты из работ [11–15])

| Тип | Кристалл | c_{11} | c_{12} | c_{44} | ρ | $k-1$ |
|-----|-------------------------------|----------|----------|----------|--------|--------|
| I | LiF ^c | 1.246 | 0.424 | 0.649 | 2.646 | 0.78 |
| | GaSb ^b | 0.885 | 0.404 | 0.433 | 5.62 | 0.85 |
| | GaAs ^a | 1.1904 | 0.5384 | 0.5952 | 5.317 | 0.90 |
| | GaN | 2.93 | 1.59 | 1.55 | 6.15 | 1.275 |
| II | SrF ₂ | 1.644 | 0.502 | 0.347 | 3.18 | -0.204 |
| | CaF ₂ ^d | 1.74 | 0.56 | 0.359 | 3.211 | -0.33 |

валось изменение анизотропии теплопроводности наноструктур при переходе от нанопроводов к квадратным ($L = W = 100D$, $D = 50$ nm) пленкам (длина которой L равна ширине пленки W) с различной ориентацией плоскостей. В работе [16] исследовался фононный транспорт в пленках на основе кристаллов первого типа Ge, Si, алмаза. Настоящая работа является продолжением этих исследований. Основное внимание в ней уделено исследованию влияния фокусировки на распространение фононов и фононный транспорт в пленках с различным типом анизотропии упругой энергии. Проанализировано влияние анизотропии упругой энергии на распределение потока фононов как в плоскостях пленок, так и в перпендикулярном сечении. Показано, что оно приводит к качественному отличию анизотропии длин пробега фононов в пленках из кубических кристаллов различного типа. Исследования этих проблем являются важными для технического использования пленок в микроэлектронике.

2. Влияние фокусировки фононов на анизотропию теплопроводность в квадратных пленках с различной ориентацией плоскостей

Рассмотрим влияние анизотропии упругой энергии на кнудсеновское течение фононного газа в пленках, когда теплосоппротивление обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. Проанализируем влияние фокусировки фононов на длины пробега фононов в квадратных пленках ($L = W$) с различным типом анизотропии упругой энергии для трех случаев, когда направление теплового потока вращается в плоскости пленки и совпадает: (1) с плоскостью грани куба YZ $\{J\} = \{100\}$, (2) с диагональной плоскостью $\{J\} = \{110\}$, (3) с плоскостью перпендикулярной диагонали куба $\{J\} = \{111\}$. Согласно [10,16], анизотропия теплопроводности и вкладов в нее от различных колебательных мод определяется длинами свободного пробега $\Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$ и $\Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$, которые зависят от двух ориентационных параметров: направления потока тепла $[I(\psi)]$ и ориентации плоскости пленки $\{J\}$. Исследуем физические причины, приводящие к анизотропии длин пробега фононов, и сравним с результатами, следующими из модели изотропной среды, которая является удобной системой сравнения для длин пробега в упруго анизотропных пленках, поскольку они полностью определяются геометрическими параметрами [10].

Рассмотрим сначала особенности фононного транспорта в квадратных пленках (см. рис. 1). При сравнении угловых зависимостей длин свободного пробега фононов в пленках с различным типом упругой анизотропии следует обратить внимание на следующие особенности. Во-первых, угловые зависимости длин свободного пробега фононов в пленках из кристаллов обоих типов с ориентациями плоскостей $\{001\}$ и $\{111\}$ изотропны, тогда как

для $\{J\} = \{110\}$ имеют эллипсоидальный вид. Причем, для $\{J\} = \{110\}$ в кристаллах первого типа длинная ось направлена вдоль $[100]$, для кристаллов второго типа — вдоль $[110]$. Во-вторых, в пленках из кристаллов первого типа с ориентациями плоскостей $\{001\}$ средние длины пробега для всех материалов принимают максимальные значения и оказываются больше, чем в модели изотропной среды (см. рис. 1, *a*), тогда как в пленках из кристаллов второго типа они принимают минимальные значения и оказываются меньше, чем в модели изотропной среды (см. рис. 1, *d*). Так, например, для GaAs они превосходят Λ_{iso} в 1.9, а для CaF₂ они на 11% меньше, чем Λ_{iso} . В-третьих, для пленок с ориентациями плоскостей $\{111\}$ складывается обратная ситуация: в пленках из кристаллов первого типа средние длины пробега оказываются меньше, а в пленках из кристаллов второго типа — больше, чем Λ_{iso} (см. рис. 1, *c, f*). Так, для пленок GaAs они становятся меньше, чем Λ_{iso} на 12%, а для пленок CaF₂ они становятся на 18% больше Λ_{iso} . Итак, мы показали, что анизотропия длин свободного пробега в квадратных пленках для кристаллов первого и второго типа качественно отличается.

Далее проанализируем влияние упругой анизотропии на распространение акустических мод в квадратных пленках с различной ориентацией и определим физические причины, которые обуславливают зависимость теплопроводности от ориентации плоскостей пленок. Для пленок с плоскостью $\{100\}$ медленная квазипоперечная мода t_2 фокусируется и дефокусируется в направлениях $[100]$ и $[110]$ соответственно. Для продольных фононов в этих направлениях происходит дефокусировка и локальный максимум фокусировки соответственно. Угол между этими направлениями составляет $\Delta\varphi = \pi/4$. В пленках с плоскостью $\{111\}$ угол между направлениями фокусировки $[110]$ и дефокусировки $[11\bar{2}]$ для моды t_2 и продольных фононов составляет $\Delta\varphi = \pi/6$.

Рассмотрим распределение длин пробега фононов в пленках с различной ориентацией по углам $\Phi(\theta, \varphi)$ в плоскости пленок, а также их распределение по углам $\Theta(\theta, \varphi)$ в поперечных сечениях. Для этого перейдем в систему координат, связанную с пленкой. Ось Z направим перпендикулярно плоскости пленки. В этом случае угол Φ определяет распределение теплового потока в плоскости пленки, а угол Θ — в поперечном сечении. В новой системе координат распределение длин пробега в пленках по углам Θ и Φ может быть определено следующим образом:

$$\Lambda_{[I]}^{\lambda\{J\}}(\Theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\Phi \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi),$$

$$\Lambda_{[I]}^{\lambda\{J\}}(\Phi) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \Theta) \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi). \quad (1)$$

В пленках, имеющих ориентацию $\{100\}$ угол $\Phi = \varphi$ и $\Theta = \theta$, а величины $\Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)$ определены в [16].

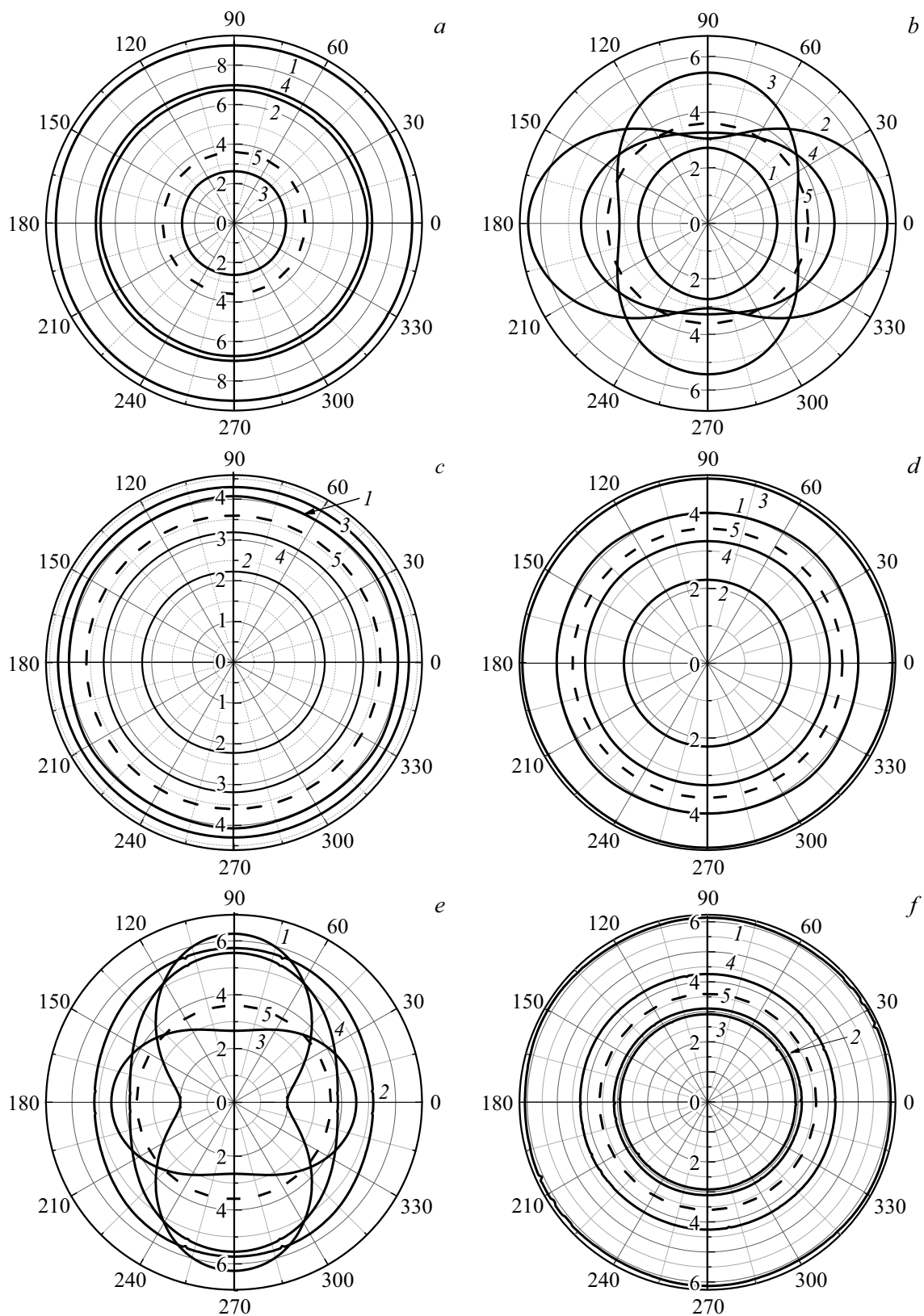


Рис. 1. Угловые зависимости длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}/D$ и $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[l(\psi)]}^{\{J\}}/D$, нормированных на толщину квадратных пленок с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50$ nm, для GaAs (a, b, c) и CaF₂ (d, e, f), когда градиент температур вращается в плоскости пленки {100} (a, d), {110} (b, e) и {111} (c, f). Кривые 1 — быстрая поперечная мода, 2 — медленная поперечная мода, 3 — продольная мода, 4 — средняя длина свободного пробега, 5 — длина свободного пробега, рассчитанная в модели изотропной среды.

Таблица 2. Отношения длин свободного пробега для квадратных пленок с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50 \text{ nm}$ в симметричных направлениях

| Соединение | $\Lambda_{[J(\psi)]}^{r1\{100\}} : \Lambda_{[J(\psi)]}^{r2\{100\}} : \Lambda_{[J(\psi)]}^{L\{100\}} : \bar{\Lambda}_{[J(\psi)]}^{\{100\}} : \Lambda_{iso}$ | $\Lambda_{[J(\psi)]}^{r1\{111\}} : \Lambda_{[J(\psi)]}^{r2\{111\}} : \Lambda_{[J(\psi)]}^{L\{111\}} : \bar{\Lambda}_{[J(\psi)]}^{\{100\}} : \Lambda_{iso}$ | $\Lambda_{[100]}^{\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{\{110\}} : \Lambda_{[110]}^{\{111\}}$ |
|------------------|--|--|---|
| LiF | 3.36:1.84:0.76:2.23:1 | 1.13:0.65:1.18:0.91:1 | 2.45:1.51:1.04:1 |
| GaSb | 2.57:1.87:0.74:1.97:1 | 1.12:0.62:1.19:1 | 2.23:1.44:1.03:1 |
| GaAs | 2.50:1.87:0.73:1.94:1 | 1.12:0.62:1.19:0.89:1 | 2.20:1.44:1.03:1 |
| GaN | 1.85:1.86:0.68:1.7:1 | 1.07:0.64:1.22:0.86:1 | 1.97:1.35:1.04:1 |
| SrF ₂ | 1.01:0.73:1.17:0.9:1 | 1.52:0.91:0.9:1.16:1 | 0.78:1.06:1.61:1 |
| CaF ₂ | 1.12:0.62:1.37:0.9:1 | 1.69:0.87:0.81:1.18:1 | 0.77:0.91:1.31 |

Определим актуальный интервал углов, дающий основной вклад при усреднении длин пробега по углам Φ в плоскости пленки. Для этого построим зависимости длин пробега от угла Φ и определим актуальный интервал углов, дающий основной вклад в $\Lambda_{[J(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Phi)$. Анализ показал, что для квадратных пленок этот интервал углов составляет приблизительно $\Delta\Phi \cong \pi/2$, а для некоторых мод несколько превышает это значение. Из этого следует, что для произвольного направления потока тепла область усреднения захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому после усреднения по углам Φ для квадратных пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ длины пробега становятся изотропными (см. рис. 1).

Как видно из рис. 1, *a*, для квадратных пленок на основе кристаллов первой группы с ориентацией $\{100\}$ максимальную длину свободного пробега имеют быстрые поперечные фононы, для них $\Lambda_{[J(\psi)]}^{r1\{100\}}$ оказывается больше, чем в модели изотропной среды. Так, например, для пленок GaAs отношение $\Lambda_{[J(\psi)]}^{r1\{100\}} : \Lambda_{iso}$ составляет 2.5. Длины пробега продольных фононов для $\{J\} = \{100\}$ имеют значения меньшие, чем $\Lambda_{iso} : \Lambda_{[J(\psi)]}^{L\{111\}} : \Lambda_{iso} = 0.73$. В противоположность этому в квадратных пленках на основе кристаллов второй группы с ориентацией $\{100\}$ максимальную длину свободного пробега имеют продольные фононы: для пленок CaF₂ $\Lambda_{[J(\psi)]}^{L\{100\}} : \Lambda_{iso} = 1.4$. А минимальную — медленные поперечные фононы: для CaF₂ $\Lambda_{[J(\psi)]}^{r2\{100\}} : \Lambda_{iso} = 0.62$. Для остальных кристаллов отношения длин свободного пробега для симметричных направлений приведены в табл. 2.

При переходе к пленкам с $J = \{111\}$ в кристаллах первого типа длины пробега поперечных фононов уменьшаются более, чем в 2 раза: при этом, для медленной поперечной моды они становятся меньше Λ_{iso} : для GaAs $\Lambda_{[J(\psi)]}^{r2\{111\}} : \Lambda_{iso} = 0.62$. Напротив, длины пробега для продольных фононов возрастают и становятся в 1.2 раза больше, чем Λ_{iso} . А для пленок из кристаллов второго типа длины пробега поперечных фононов увеличиваются, а продольных уменьшаются. Максимальные длины пробега имеет быстрая поперечная мода: для CaF₂ $\Lambda_{[J(\psi)]}^{r1\{100\}}$ в 1.7 раза больше, чем Λ_{iso} . Длины пробега для

продольных фононов становятся меньше, чем Λ_{iso} : так для CaF₂ $\Lambda_{iso} = 0.8$.

Другая ситуация с анизотропией имеет место для потока тепла в квадратных пленках с $\{J\} = \{110\}$, где зависимости теплопроводности и средних длин пробега имеют эллипсоидальный вид с длинной осью в направлении $[100]$ для кристаллов первого типа, и в направлении $[110]$ для кристаллов второго типа. Как видно из рис. 1, *b*, для кристаллов первого типа эта зависимость обусловлена модой t_2 , которая фокусируется в направлении $[100]$ и определяют направление длинной оси эллипса. Направление ее дефокусировки $[110]$ определяет короткую ось эллипса. Для пленок из кристаллов второго типа анизотропия длин свободного пробега определяется быстрой поперечной модой, которая фокусируется и дефокусируется в направлениях $[110]$ и $[100]$ соответственно. Таким образом, при переходе к пленкам из кристаллов второго типа направления длинной и короткой осей эллипса меняются местами (см. рис. 1, *e*). Однако угол между этими направлениями в обоих случаях составляет $\Delta\Phi = 90^\circ$. Этот угол оказывается слишком велик, чтобы при усреднении по углу Φ в плоскости пленки полностью размыть эффект фокусировки, в отличие от пленок с $\{J\} = \{100\}$ и $\{111\}$. Поэтому при усреднении по углам Φ анизотропия вкладов фононных мод в теплопроводность не усредняется, и теплопроводность в плоскости пленки $J = \{110\}$ остается анизотропной, как и вклады поперечных и продольных фононов (см. рис. 1, *c, e*). Для медленной поперечной моды длина пробега в пленках GaAs в направлении $[100]$ оказывается в 1.8 раза больше, чем в модели изотропной среды. Однако в направлениях дефокусировки она становится меньше на 10%, чем в изотропной среде. Для продольных фононов имеем обратную ситуацию: их длины пробега в пленках GaAs в направлении $[110]$ оказываются в 1.5 раза больше, а в направлении $[100]$ — в 1.4 меньше, чем Λ_{iso} . Однако в виду малой по сравнению с поперечными фононами плотностью состояний их вклад недостаточен, чтобы кардинально изменить вид полной теплопроводности для рассматриваемых материалов.

Проведенный анализ показал, что с увеличением длины пленок с $J = \{100\}$ и $\{111\}$ интервалы углов,

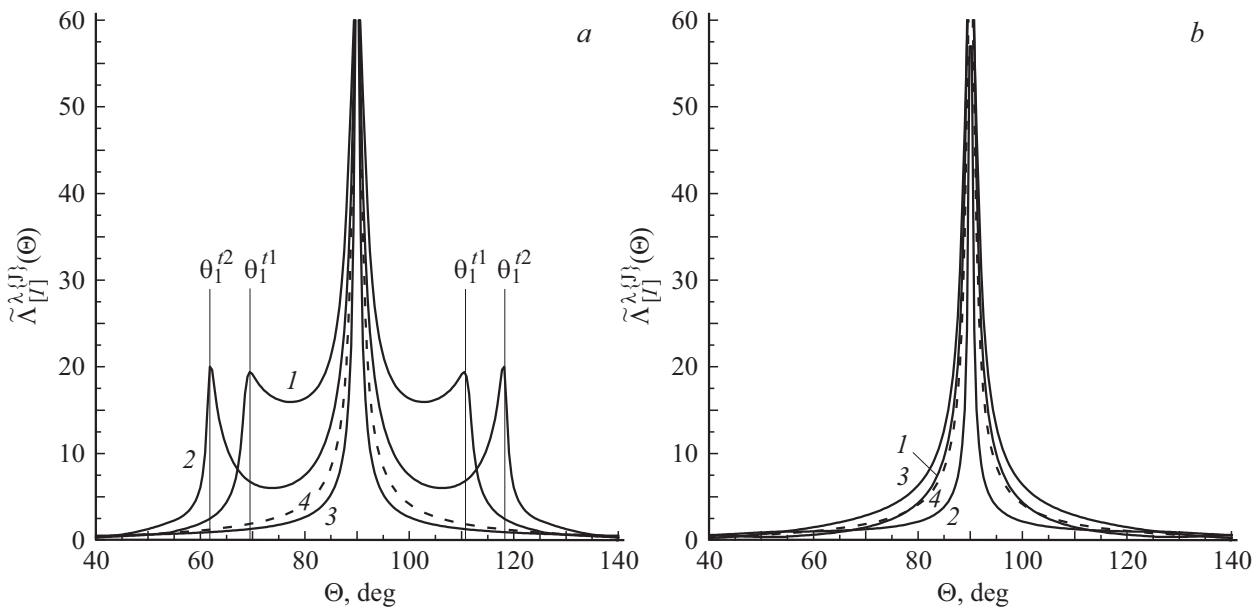


Рис. 2. Распределение длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l]}^{\lambda\{J\}}(\Theta)$ в поперечном сечении для пленок GaAs (a) и CaF₂ (b) с ориентацией {100} и параметрами $L = W = 100D$, $D = 50$ nm: кривые 1 — для моды t_1 , кривые 2 — для моды t_2 , кривые 3 — для продольных фононов, кривая 4 — для модели изотропной среды.

дающих при усреднении длин пробега основной вклад, значительно сужаются. Поэтому при переходе к длинным пленкам $L \gg W$ усреднение по углам Φ в плоскостях этих пленок оказывается уже недостаточным, чтобы полностью размыть эффект фокусировки фононов. В результате длины пробега становятся анизотропными. Основной вклад в анизотропию теплопроводности и средних длин пробега фононов в пленках с ориентацией {100} на основе кристаллов первого типа вносят медленные поперечные моды. Они фокусируются в направлениях [100] и их длины пробега в пленках GaAs оказываются на 53% больше, чем в направлениях [110]. Однако в этих направлениях длины пробега $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t2}$ имеют локальные минимумы, а максимальных значений они достигают при углах $\Psi = \pi/2 \pm \theta_3$, и их величины в пленках GaAs оказываются на 10% меньше. Анизотропия теплопроводности и средних длин пробега в длинных пленках ($L \gg W$) оказывается несколько меньше: отношение $\Lambda_{[100]}^{\{100\}} : \Lambda_{[110]}^{\{100\}} = 1.21$. В пленках из кристаллов второго типа для ориентации $J = \{100\}$ основной вклад в теплопроводность вносит быстрая поперечная мода, которая фокусируется в секторе $[\pi/4 - \theta_3, \pi/4 + \theta_3]$ и обеспечивает максимум теплопроводности. Так, например, для пленок CaF₂ $\Lambda_{[110]}^{\{100\}t1} : \Lambda_{[100]}^{\{100\}t1} = 1.35$, а $\Lambda_{[110]}^{\{100\}} : \Lambda_{[100]}^{\{100\}} = 1.13$. Отметим, что в длинных пленках GaAs с ориентацией {100} средние длины пробега фононов оказываются больше, а для ориентации {111} — меньше, чем Λ_{iso} . Тогда как в кристаллах второго типа ситуация обратная: для пленок с $J = \{100\}$ средние длины пробега фононов оказываются меньше, а для $J = \{111\}$ — больше, чем Λ_{iso} . Итак, для длинных

пленок из кристаллов первого и второго типа длины пробега фононов качественно отличаются. Отметим, что в длинных пленках с ориентацией {110} эллипсоидальный вид средних длин пробега сохраняется.

3. Влияние фокусировки на распространение фононных мод в квадратных пленках с ориентациями плоскостей {100} и {111}

Рассмотрим влияние фокусировки на распространение фононных мод. Для этого усредним длины пробега по углам Φ в плоскостях пленок и построим их зависимости от угла Θ в поперечном сечении пленки, которое включает направление теплового потока (см. рис. 2). Как видно из рис. 2, a, для поперечных фононов в пленках из кристаллов первого типа с ориентацией {100} преобладает эффект фокусировки, и усредненные по углам Φ длины пробега $\Lambda_{[001]}^{t1\{100\}}(\Theta)$ и $\Lambda_{[001]}^{t2\{100\}}(\Theta)$ при всех углах Θ оказываются больше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$, тогда как для продольных фононов — наоборот: их длины пробега при всех углах оказываются меньше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$. В кристаллах второго типа ситуация обратная: для медленной поперечной моды $\Lambda_{[001]}^{t2\{100\}}(\Theta)$ гораздо меньше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$, а для $\Lambda_{[001]}^{t1\{100\}}(\Theta)$ незначительно превышает значения $\Lambda_{iso}(\Theta)$. Для продольных фононов преобладает эффект фокусировки и их длина пробега оказываются больше, чем Λ_{iso} . Однако вклад продольных фононов в теплопроводность мал. Отсюда следует, средние длины

пробега в пленках из кристаллов второго типа будут меньше, а из первого типа больше, чем Λ_{iso} .

Следует отметить, что возникновение боковых максимумов на зависимостях $\Lambda_{[001]}^{t2\{100\}}(\Theta)$ (см. рис. 2, а) обусловлено построением распределения длин пробега по поперечному сечению пленки в пространстве волновых векторов. В координатном пространстве (или пространстве групповых скоростей) они соответствуют волновым векторам с углами $\pm\theta_1^2$, групповая скорость которых совпадает с направлением $[100]$, т.е. боковые максимумы перейдут в центральный пик, соответствующий направлению градиента температуры.

Для квадратных пленок с $J = \{111\}$ зависимости длин пробега $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{100\}}(\Theta)$ для всех акустических мод существенно изменяются (см. рис. 3). Центральный максимум сохраняется только для изотропной среды $\Lambda_{iso}(\Theta)$, а для всех акустических мод зависимости длин пробега $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{100\}}(\Theta)$ в пленках из кристаллов обоих типов в окрестности направления теплового потока (оси пленки) имеют плавные минимумы (см. рис. 3). Это означает, что для всех мод в направлениях близких к направлению теплового потока преобладают эффекты дефокусировки, в отличие от пленок с ориентацией $\{100\}$. Причем, длины пробега $\Lambda_{\{111\}}^2(\Theta)$ в пленках из кристаллов первого типа GaAs почти во всем интервале углов Θ оказываются меньше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$, за исключением узких интервалов $84 < \Theta < 86^\circ$ и $930 < \Theta < 96^\circ$, где они имеют локальные максимумы. Очевидно, что среднее значение $\Lambda_{\{111\}}^2$ будет меньше, чем Λ_{iso} . Для быстрой поперечной и продольной мод интервалы углов Θ , где $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}(\Theta) > \Lambda_{iso}(\Theta)$ значительно шире, поэтому средние значения для них будут незначительно выше, чем Λ_{iso} (см. рис. 1). Однако при этом средняя длина свободного пробега для GaAs оказывается меньше, чем в модели изотропной среды.

Для пленок из кристаллов второго типа CaF₂ боковые пики для быстрой поперечной моды оказываются значительно выше, чем для GaAs. Поэтому средние длины пробега $\Lambda_{\{111\}}^1$ в них оказываются почти в 1.7 раза больше, чем Λ_{iso} , и в 1.5 раза больше, чем в GaAs. Для медленной поперечной и продольной мод интервалы углов Θ , где $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}(\Theta) > \Lambda_{iso}(\Theta)$ значительно уже, поэтому средние значения $\Lambda_{[l(\psi)]}^{\lambda\{111\}}$ для них оказываются меньше, чем Λ_{iso} (см. рис. 1). Доминирующая роль быстрой поперечной моды в пленках CaF₂ приводит к тому, что средняя длина свободного пробега для них оказывается больше, чем в модели изотропной среды в 1.4 раза.

Из работ Фукса, Зондгеймера [17,18] известно, что при достаточно низких температурах теплосоппротивление пленок определяется, главным образом, рассеянием на плоскостях пленок. В теории Казимира предполагается, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца.

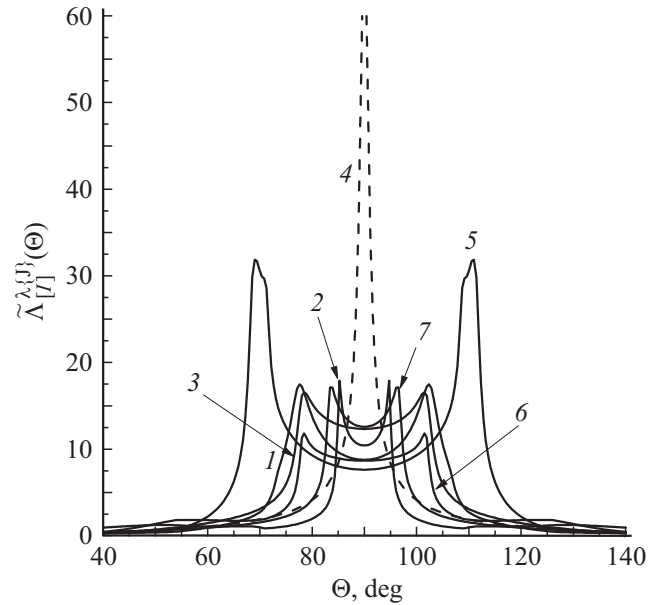


Рис. 3. Распределение длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta)$ в поперечном сечении для пленок GaAs (кривые 1, 2, 3) и CaF₂ (кривые 5, 6, 7) с ориентацией $\{111\}$ и параметрами $L = W = 100D$, $D = 50$ nm: кривые 1, 5 — для моды t_1 , кривые 2, 6 — для моды t_2 , кривые 3, 7 — для продольных фононов, кривая 4 — для модели изотропной среды.

Поэтому в каждой точке поверхности независимо от ее ориентации и параметров анизотропии $k-1$ фононы всех поляризаций рассеиваются диффузно. Таким образом, рассеивающая способность или интенсивность рассеяния пленок с различной ориентацией плоскостей одинакова. Поэтому предположение о различной „рассеивающей способности“ плоскостей пленок с различной ориентацией в [19] для характеристики влияния фокусировки фононов на их теплопроводность пленок является физически некорректным. Итак, мы показали, что влияние фокусировки фононов на теплопроводность пленок связано с отличием направления распространения фононов и направления волнового вектора и обусловлено упругой анизотропией кристаллов. Если направление теплового потока и ось пленки совпадает с направлением фокусировки одной из мод, то направления распространения фононов этой моды будут отклоняться от плоскостей пленки к ее оси и длина пробега этих фононов будет возрастать, как это имеет место для медленных поперечных фононов в пленках с ориентацией $\{100\}$ и направлением потока тепла [100].

4. Заключение

Исследовано влияние фокусировки фононов на распространение фононов и фононный транспорт в пленках с различным типом анизотропии упругой энергии. Ос-

новные результаты исследований могут быть сформулированы следующим образом:

1. Установлены физические причины, приводящие к изотропной зависимости теплопроводности для квадратных пленок из кристаллов обоих типов с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$. Показано, что анизотропия длин свободного пробега в квадратных пленках обусловлена их зависимостью от ориентации плоскости. Для кристаллов первого и второго типа она качественно отличается: максимальные значения теплопроводности из кристаллов первого типа достигаются для ориентации $\{001\}$, а минимальные — для $\{111\}$. Однако в пленках из кристаллов второго типа максимальные значения достигаются для $J = \{111\}$, а минимальные — для $J = \{001\}$.

2. Для квадратных пленок с ориентацией $\{110\}$ угловые зависимости длин пробега фононов в пленках из кристаллов разного типа также качественно отличаются: они имеют эллипсоидальный вид, но в кристаллах первого типа длинная ось эллипсоида направлена вдоль $[100]$, а короткая — вдоль $[110]$; тогда, как для кристаллов второго типа наоборот — длинная ось эллипсоида — вдоль $[110]$, а короткая — вдоль $[100]$.

3. Анализ распределения длин пробега в поперечном сечении квадратных пленок показал, что теплопроводность и средние длины пробега фононов в пленках с ориентацией $\{100\}$ из кристаллов первого типа имеют большие значения, чем для пленок из кристаллов второго типа, поскольку для первых преобладает эффект фокусировки, тогда как для вторых — эффект дефокусировки фононов. Однако в пленках с ориентацией $\{111\}$ из кристаллов второго типа средние длины пробега фононов оказываются больше, чем для пленок из кристаллов первого типа.

Список литературы

- [1] D.G. Cahill, W.K. Ford, K.E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin, S.R. Phillpot. *J. Appl. Phys.* **93**, 793 (2003).
- [2] A.D. McConnell, K.E. Goodson. *Ann. Rev. Heat Transfer.* **14**, 129 (2005).
- [3] D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi, P. Yang, A. Majumdar. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2934 (2003).
- [4] M. Asheghi, Y.K. Leung, S.S. Wong, K.E. Goodson. *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1798 (1997); M. Asheghi, M.N. Touzelbaev, K.E. Goodson, Y.K. Leung, S.S. Wong. *J. Heat Transfer.* **120**, 30 (1998).
- [5] 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. *J. Appl. Phys. Rev.* **1**, 011305 (2014).
- [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] И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, И.Г. Кулеев, В.В. Устинов. *ЖЭТФ* **147**, 736 (2015).
- [9] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. *ФТТ* **49**, 422 (2007).
- [10] B. Truel, C. Elbaum, B.B. Chick. *Ultrasonic methods in solid state physics.* Academic press. N.Y.—London (1969). 464 p.
- [11] J.R. Drabble, A.J. Brammer. *Solid State Commun.* **4**, 467 (1966).
- [12] C.V. Briscoe, C.F. Squire. *Phys. Rev.* **106**, 1175 (1957).
- [13] H.J. McSkimin, Andreatch. *J. Appl. Phys.* **35**, 2161 (1964).
- [14] H.J. McSkimin, W.L. Bond. *Phys. Rev.* **105**, 116 (1957).
- [15] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С.М. Бахарев. *ЖЭТФ* **146**, 522 (2014).
- [16] И.И. Кулеев. *ФТТ* **59**, 668 (2017).
- [17] K. Fuchs. *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **34**, 100 (1938).
- [18] E.H. Sondheimer. *Adv. Phys.* **1**, 1 (1952).
- [19] Z. Aksamija, I. Knezevic. *Phys. Rev. B* **82**, 045319 (2010).