

ВЛИЯНИЕ НОРМАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ ФОНОН-ФОНОННОГО РАССЕЯНИЯ НА МАКСИМАЛЬНЫЕ ВЕЛИЧИНЫ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ИЗОТОПИЧЕСКИ ЧИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ

И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев*

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

Поступила в редакцию 18 февраля 2002 г.

Рассмотрено влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на теплопроводность кристаллов кремния с различной степенью изотопического беспорядка. Учтено перераспределение импульса фононов в нормальных процессах рассеяния как внутри каждой колебательной ветви (обобщенная модель Каллавея), так и между различными колебательными ветвями фононов (механизм Херринга). Найдены значения параметров, определяющих релаксацию импульса фононов в ангармонических процессах рассеяния. Проанализированы вклады дрейфового движения продольных и поперечных фононов в теплопроводность. Показано, что перераспределение импульса между продольными и поперечными фононами в механизме релаксации Херринга является эффективным механизмом, ограничивающим максимальные значения теплопроводности изотопически чистых кристаллов кремния. Рассчитана зависимость максимальных значений теплопроводности от степени изотопического беспорядка. Дана оценка максимальных значений теплопроводности изотопически чистых кристаллов кремния для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах фонон-фононного рассеяния.

PACS: 77.84.-s

1. ВВЕДЕНИЕ

В связи с интенсивным развитием современных полупроводниковых технологий особую актуальность приобрели исследования физических свойств изотопически обогащенных кристаллов германия, кремния и алмаза [1–11], теплопроводность которых существенно возрастает с уменьшением изотопического беспорядка. Использование изотопически обогащенных кристаллов в качестве подложек для микросхем позволило бы существенно увеличить стабильность работы микропроцессоров и значительно повысить плотность элементов в микросхемах за счет более быстрого отвода тепла. Экспериментальные исследования теплопроводности и термоэдс [2–5], проведенные на кристаллах германия с различной степенью изотопического беспорядка, показали, что максимальные значения

теплопроводности в изотопически чистых образцах, содержащих 99.99 % изотопа ^{70}Ge , на порядок выше, а абсолютные значения термоэдс более чем в два раза превышали значения, полученные для кристаллов с природным изотопическим составом. При переходе от кристаллов кремния с природным изотопическим составом к кристаллам кремния, содержащим 99.8588 % изотопа ^{28}Si , максимальные значения теплопроводности увеличиваются в 6 раз [6]. При комнатной температуре это увеличение составляло 60 % [6]. Поскольку германий и кремний широко используются в полупроводниковой микроэлектронике, исследование физических свойств изотопически чистых кристаллов и понимание микроскопических процессов релаксации квазичастиц в этих материалах имеют большое прикладное значение. Поэтому одной из целей данной работы является изучение влияния нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на максимальные значения теплопроводности, которые могут быть

*E-mail: kuleev@imp.uran.ru

получены в изотопически обогащенных кристаллах кремния. Проблема корректного учета нормальных процессов рассеяния фононов является особенно актуальной для изотопически обогащенных кристаллов германия, кремния и синтетических алмазов при достаточно низких температурах, когда процессы фонон-фононного переброса в значительной степени выморожены и нормальные процессы рассеяния играют критическую роль в релаксации импульса фононов [1–12]. Однако, как показано в [13], в этом случае необходим более аккуратный анализ роли нормальных процессов рассеяния фононов, принадлежащих различным колебательным ветвям, чем это сделано в работах [1–12].

Роль нормальных процессов фонон-фононного рассеяния в теории решеточной теплопроводности достаточно хорошо изучена [14–19]. Учет этих процессов рассеяния необходим в условиях, когда частота релаксации фононов в нормальных процессах, $\nu_{phN}(q)$, будет больше либо сравнима с частотой релаксации в резистивных процессах рассеяния $\nu_{phR}(q)$, которые обусловлены релаксацией фононов в процессах переброса, на границах, примесях и электронах. Нормальные процессы рассеяния не дают непосредственного вклада в релаксацию импульса фононов и, соответственно, в теплосопотвление. Однако они, перераспределяя энергию и импульс между различными фононными модами, формируют неравновесную функцию распределения фононов и приводят фононную подсистему к дрейфовому локально равновесному распределению [14–19]. Учет нормальных процессов рассеяния без разделения вкладов продольных (L) и поперечных (T) фононов в модели Каллавея [14] с использованием изотропной дебаевской модели приводил к завышенным значениям теплопроводности в области максимума для кристаллов германия и кремния с природным изотопическим составом. Позднее было показано [20], что при расчете теплопроводности кристаллов германия и кремния необходимо выделять вклады L - и T -фононов, поскольку T -фононы имеют сильную дисперсию и дебаевские температуры для обеих колебательных ветвей существенно различаются. Дальнейшее развитие теории решеточной теплопроводности сдерживалось отсутствием корректного анализа роли нормальных процессов рассеяния фононов, принадлежащих различным колебательным ветвям. В обобщенной модели Каллавея, которая широко использовалась при расчете теплопроводности изотопически обогащенных кристаллов германия, кремния и алмаза [1–12], предполагалось, что релаксация импульса фононов происходит

только внутри каждой из ветвей фононного спектра и фононы различных поляризацій вносят аддитивный вклад в теплопроводность. Эта модель давала существенно завышенные значения теплопроводности для изотопически чистых кристаллов ^{70}Ge (99.99 %) в области максимума [2]. Введение дополнительного механизма рассеяния фононов на дислокациях не могло исправить ситуацию, так как концентрация последних, согласно [21], оказалась на четыре порядка меньше, чем требовалось в [2] для согласования рассчитанных и измеренных значений теплопроводности ^{70}Ge (99.99 %) в области максимума.

В работах [13, 22] рассмотрено влияние перераспределения импульса фононов в нормальных процессах фонон-фононного рассеяния как внутри каждой колебательной ветви (механизм Саймонса), так и между различными колебательными ветвями фононов (механизм Херринга) на эффективную частоту релаксации электронов, термоэдс увлечения и решеточную теплопроводность проводников. Показано, что рассмотренные величины существенным образом зависят от характера релаксации импульса фононов в нормальных процессах рассеяния и имеют различный вид для механизмов релаксации Херринга [23] и Саймонса [24]. Анализ теплопроводности кристаллов германия с различной степенью изотопического беспорядка [13] для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах показал, что обобщенная модель Каллавея соответствует механизму релаксации Саймонса [24] и не является корректной, если основным механизмом релаксации импульса фононов в нормальных процессах является механизм Херринга [23], как это имеет место в германии и кремнии. В этом случае перераспределение импульса между L - и T -фононами в нормальных процессах Херринга приводит к существенному подавлению дрейфового движения продольных фононов в изотопически чистых образцах германия (99.99 %), главным образом, за счет процессов релаксации T -фононов. Поэтому данный механизм перекачки импульса фононов в нормальных процессах приводит к значительному уменьшению максимальных значений полной теплопроводности κ_{max} изотопически обогащенных кристаллов германия. В результате максимальные значения теплопроводности кристаллов германия $\kappa_{max}(g)$ как функции параметра изотопического беспорядка g достигают насыщения при значениях g меньших чем 10^{-6} (что соответствует содержанию изотопа ^{70}Ge , равному 99.9 %), однако существенно зависят от величины и характера граничного рассеяния фононов. Таким

образом, дальнейшее увеличение изотопической чистоты кристаллов германия может привести к увеличению значений κ_{max} по сравнению с величинами, достигнутыми для ^{70}Ge (99.99 %) [2] менее чем на 1 %. Этот вывод работы [13] имеет важное практическое значение. Предложенная нами модель перераспределения импульса фононов в нормальных процессах рассеяния Херринга [23] позволила описать экспериментальные данные теплопроводности кристаллов германия с различной степенью изотопического беспорядка более адекватно, чем использованная ранее обобщенная модель Каллавея [1, 2, 6–12]. При этом отпадает необходимость введения дополнительного механизма рассеяния фононов на дислокациях для ^{70}Ge (99.99 %) [2] и еще одного подгоночного параметра теории.

В данной работе воспользуемся методом, изложенным в работах [13, 22], и рассчитаем теплопроводность кристаллов кремния с различным изотопическим составом для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах рассеяния. Основываясь на данных работ [1, 2, 6, 25], найдем параметры, определяющие частоты релаксации фононов в резистивных и нормальных процессах рассеяния. Проанализируем вклады дрейфового движения L - и T -фононов в теплопроводность кремния с различной степенью изотопического беспорядка. Оценим, какие максимальные значения теплопроводности можно получить в совершенных, химически чистых и изотопически однородных, кристаллах кремния.

2. НОРМАЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ ФОНОН-ФОНОННОГО РАССЕЯНИЯ И РЕШЕТОЧНАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ С РАЗЛИЧНЫМ ИЗОТОПИЧЕСКИМ СОСТАВОМ

Выражение для решеточной теплопроводности с разделением вкладов от различных ветвей фононного спектра, как показано в [13], имеет вид

$$\kappa(T) = \sum_{\lambda} \frac{k_B s_{\lambda}^2 q_{T\lambda}^3}{6\pi^2} \int_0^{z_{d\lambda}} dz_q^{\lambda} \times \\ \times \frac{(z_q^{\lambda})^4}{\tilde{\nu}_{\lambda^{ph}}^{(S,H)}(q)} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1), \quad (1)$$

где

$$z_q^{\lambda} = \frac{\hbar\omega_{q\lambda}}{k_B T} = \frac{q}{q_{T\lambda}}, \quad q_{T\lambda} = \frac{k_B T}{\hbar s_{\lambda}},$$

$N_{q\lambda}^0$ — функция Планка, s_{λ} — скорость акустических фононов с поляризацией λ , $z_{d\lambda} = \hbar\omega_{d\lambda}/k_B T$ ($\omega_{d\lambda}$ — дебаевская частота фононов с поляризацией λ), $\tilde{\nu}_{\lambda^{ph}}^{(S,H)}(q)$ — эффективная частота релаксации импульса фононов. Учет нормальных процессов фонон-фононного рассеяния сводится к перенормировке частоты релаксации импульса фононов, входящей в решеточную теплопроводность. Эта перенормировка носит различный характер, если нормальные процессы перераспределяют импульс фононов внутри каждой колебательной ветви (механизм Саймонса [24]), либо перераспределение импульса идет преимущественно между различными колебательными ветвями (механизм Херринга [23]):

$$\tilde{\nu}_{\lambda^{ph}}^{(S,H)}(q) = \nu_{ph}^{\lambda}(q) (1 + \nu_{phN}^{\lambda}(q) \beta_{(S,H)})^{-1}, \quad (2)$$

$$\beta_S = \frac{\Psi_N^{\lambda}}{\Psi_{NR}^{\lambda}}, \quad \beta_H = \left(\frac{s_L}{s_T}\right)^2 \frac{\Psi_N^L + 2S_*^3 \Psi_N^T}{\Psi_{NR}^L + 2S_*^5 \Psi_{NR}^T}. \quad (3)$$

Здесь

$$\Psi_N^{\lambda} = \left\langle \frac{\nu_{phN}^{\lambda}(q)}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} \right\rangle_{z_{d\lambda}} \equiv \\ \equiv \int_0^{z_{d\lambda}} dz_q^{\lambda} (z_q^{\lambda})^4 \frac{\nu_{phN}^{\lambda}(q)}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1), \quad (4)$$

$$\Psi_{NR}^{\lambda} = \left\langle \frac{\nu_{phR}^{\lambda}(q) \nu_{phN}^{\lambda}(q)}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} \right\rangle_{z_{d\lambda}},$$

$S_* = s_L/s_T$, $\nu_{ph}^{\lambda}(q) = \nu_{phN}^{\lambda}(q) + \nu_{phR}^{\lambda}(q)$ — полная частота релаксации фононов с волновым вектором q и поляризацией λ , $\nu_{phN}^{\lambda}(q)$ — частота релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния, $\nu_{phR}^{\lambda}(q) = \nu_{phU}^{\lambda}(q) + \nu_{phi}^{\lambda}(q) + \nu_{phB}^{\lambda}(q)$ — частота релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния, обусловленных рассеянием фононов на фононах в процессах переброса ($\nu_{phU}^{\lambda}(q)$), дефектах ($\nu_{phi}^{\lambda}(q)$) и границах образца ($\nu_{phB}^{\lambda}(q)$). В кремнии, согласно [26], для направления [111] имеем $s_L = 9.35 \cdot 10^5$ см/с, $s_T = 5.09 \cdot 10^5$ см/с, $S_* = 1.84$, для направления [100] $s_L = 8.43 \cdot 10^5$ см/с, $s_T = 5.85 \cdot 10^5$ см/с, $S_* = 1.44$.

В механизме релаксации Саймонса [24] участвуют фононы одной поляризации. Для этого механизма рассеяния ($\nu_{phN}^{\lambda} \approx \nu_{ph}^{\lambda} \omega_{\lambda}$) закон сохранения импульса в нормальных процессах выполняется для каждой из ветвей фононного спектра, и скорость дрейфа L - и T -фононов будет различной [13]. Выражение для решеточной теплопроводности в этом

случае является суммой вкладов от фононов различных поляризаций:

$$\begin{aligned} \kappa(T) &= \sum_{\lambda} \frac{k_B}{6\pi^2 s_{\lambda}} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \times \\ &\times \int_0^{z_{d\lambda}} dz f(z) \left(1 + \nu_{phN}^{\lambda}(q) \frac{\Psi_{NR}^{\lambda}}{\Psi_{NR}^{\lambda}} \right), \quad (5) \\ f(z) &= \frac{z^4 e^z}{(e^z - 1)^2 \nu_{ph}^{\lambda}(q)}. \end{aligned}$$

Выражение (5) соответствует обобщенной модели Каллавея, которая широко использовалась при расчете теплопроводности изотопически обогащенных кристаллов германия, кремния и алмаза [1, 2, 6–12]. Оно справедливо, когда нормальные процессы перераспределяют импульс фононов только внутри каждой колебательной ветви, и соответствует механизму Саймонса [24].

Однако доминирующим механизмом нормальных трехфононных процессов рассеяния в кристаллах германия и кремния является механизм Херринга [23], который приводит к перераспределению импульса между различными колебательными ветвями. Для этого механизма частота релаксации поперечных фононов ($\nu_{phN}^T \approx B_T T^4 \omega_T$) определяется трехфононными процессами рассеяния ($T + L \leftrightarrow L$), в которых участвует один T - и два L -фонона [16]. Частота релаксации L -фононов в модели анизотропного континуума ($\nu_{phN}^L \approx B_L T^3 \omega_L^2$) определяется трехфононными процессами распада L -фонона на два T -фонона, принадлежащих различным ветвям, либо слиянием двух T -фононов с возникновением L -фонона ($L \leftrightarrow T_1 + T_2$) [15–17]. Итак, в механизме нормальных процессов Херринга участвуют фононы различных поляризаций, и этот механизм релаксации обеспечивает перераспределение дрейфового импульса между продольными и поперечными фононами. Таким образом, трехфононные процессы Херринга в неравновесной фононной системе стремятся установить локально равновесное распределение со средней дрейфовой скоростью, одинаковой для фононов обеих поляризаций $u_L = u_T = u_N$. Решение кинетического уравнения для фононной функции распределения в этом случае ($u_T = u_L = u_{ph}$) приводит к следующему выражению для вкладов продольных и поперечных фононов в решеточную теплопроводность [13]:

$$\begin{aligned} \kappa^L(T) &= \frac{k_B}{6\pi^2 s_L} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \times \\ &\times \int_0^{z_{dL}} dz f(z) \left(1 + \nu_{phN}^L \frac{\Psi_{NR}^L + 2S_*^3 \Psi_{NR}^T}{\Psi_{NR}^L + 2S_*^5 \Psi_{NR}^T} \right), \quad (6) \\ \kappa^T(T) &= \frac{k_B}{3\pi^2 s_T} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \times \\ &\times \int_0^{z_{dT}} dz f(z) \left(1 + S_*^2 \nu_{phN}^T \frac{\Psi_{NR}^L + 2S_*^3 \Psi_{NR}^T}{\Psi_{NR}^L + 2S_*^5 \Psi_{NR}^T} \right). \end{aligned}$$

Поэтому для расчета решеточной теплопроводности кристаллов кремния с различной степенью изотопического беспорядка мы будем пользоваться формулами (6) и уточним результаты анализа, проведенного в работе [6] в рамках обобщенной модели Каллавея. Из формул (6) видно, что вклад T -фононов в дрейфовые слагаемые значительно усиливается за счет множителя S_* , величина которого составляет 1.84 для кремния в направлении [111].

3. ЧАСТОТЫ РЕЛАКСАЦИИ ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Найдем параметры, определяющие частоты релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния для кремния, исходя из результатов, полученных для германия [1, 2, 13]. Согласно экспериментам по рассеянию нейтронов, для германия и кремния фононные дисперсионные кривые в единицах ионной плазменной частоты близки во всем объеме зоны Бриллюэна [27]. Параметры эффективного силового взаимодействия также являются близкими по величине. Основное изменение в колебательных спектрах и в параметрах ангармонических релаксационных процессов при переходе от германия к кремнию связано с изменением массы колеблющихся атомов. Именно с этим фактором в первую очередь связано изменение эффективных дебаевских температур: $\Theta(\text{Si})/\Theta(\text{Ge}) = 1.75$. Поэтому можно определить релаксационные параметры для кремния, опираясь на результаты для германия. Согласно [1], параметр A_N , определяющий частоты релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния, имеет вид

$$A_N \propto \frac{\gamma^2}{M a^2 \Theta^5}, \quad (7)$$

где M — масса атома, a — постоянная решетки, а γ — константа Грюнайзена. Тогда для коэффициента ξ_N^{λ} , определяющего частоты релаксации фононов

Таблица 1.

	$B_N^L, 1/K^4$	$B_N^T, 1/K^3$	B_u^L, c	B_u^T, c	C_u^L, K	C_u^T, K	γ [16] (способ I)	γ [16] (способ II)	γ [28]
Ge	$2 \cdot 10^{-21}$	$2 \cdot 10^{-13}$	$5 \cdot 10^{-19}$	$1 \cdot 10^{-19}$	180	55	0.67	0.76	0.50
Si	$2.39 \cdot 10^{-22}$	$1.99 \cdot 10^{-14}$	$2.2 \cdot 10^{-19}$	$4.1 \cdot 10^{-20}$	308	98	0.51	0.47	0.42
ξ	0.12	0.1	0.44	0.41					

Таблица 2.

	A_i^L, c^{-1}	A_i^T, c^{-1}	A_N^L, c^{-1}	A_N^T, c^{-1}	A_u^L, c^{-1}	A_u^T, c^{-1}	C_u^L, K	C_u^T, K
Ge	$37.1 \cdot 10^6$	$167 \cdot 10^6$	$3.4 \cdot 10^6$	$2.6 \cdot 10^3$	$8.6 \cdot 10^6$	$1.72 \cdot 10^6$	180	55
Si	$5.8 \cdot 10^6$	$35.7 \cdot 10^6$	$0.41 \cdot 10^6$	$0.26 \cdot 10^3$	$3.77 \cdot 10^6$	$0.70 \cdot 10^6$	308	98

Примечание. В работе [13] допущена опечатка для значений A_u^λ (переставлены местами величины A_u^L и A_u^T), правильные значения приведены в табл. 2.

в нормальных процессах рассеяния в кремнии через соответствующие величины для германия, получим

$$A_N^\lambda(\text{Si}) = \xi_N^\lambda A_N^\lambda(\text{Ge}),$$

$$\xi_N^\lambda = \left(\frac{\gamma_{\text{Si}}}{\gamma_{\text{Ge}}} \right)^2 \left(\frac{M_{\text{Ge}}}{M_{\text{Si}}} \right) \left(\frac{a_{\text{Ge}}}{a_{\text{Si}}} \right)^2 \left(\frac{\Theta_{\text{Ge}}^\lambda}{\Theta_{\text{Si}}^\lambda} \right)^5. \quad (8)$$

Если не учитывать изменение константы Грюнрайзена при переходе от германия к кремнию, как это предполагалось в [1], и воспользоваться значениями эффективных температур Дебая $\Theta(\text{Si}) = 650$ К, $\Theta(\text{Ge}) = 376$ К [20], то для параметра перехода получим $\xi_N = 0.17$. При учете различия температур Дебая для L - и T -фононов ($\Theta^L(\text{Si}) = 570$ К, $\Theta^T(\text{Si}) = 210$ К, $\Theta^L(\text{Ge}) = 333$ К, $\Theta^T(\text{Ge}) = 118$ К [20]) можно получить следующие оценки для параметра ξ_N^λ :

$$\xi_N^L \approx 0.19, \quad \xi_N^T \approx 0.16. \quad (9)$$

Оценим изменение параметра ξ_N^λ при учете различия параметров Грюнрайзена γ_{Ge} и γ_{Si} . Отметим, что величины параметров Грюнрайзена γ_{Ge} и γ_{Si} значительно различаются в зависимости от способа определения [16, 28]. Из непосредственного измерения констант упругости третьего порядка следует, что $\gamma_{\text{Ge}} = 0.67$, $\gamma_{\text{Si}} = 0.51$ (см. табл. 1) [16] (способ I), тогда из (8) получим

$$\xi_N^L \approx 0.11, \quad \xi_N^T \approx 0.091. \quad (9a)$$

Из термодинамических соотношений [16] следует, что $\gamma_{\text{Ge}} = 0.76$, $\gamma_{\text{Si}} = 0.47$ (см. табл. 1) [16] (способ II); тогда с учетом (8) найдем

$$\xi_N^L \approx 0.073, \quad \xi_N^T \approx 0.06. \quad (9б)$$

Из выражений для частот релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния [16] (формулы (1.3.6), (1.3.13)) для различных значений параметров Грюнрайзена (см. табл. 1) получим

$$0.05 \leq \xi_N^L \leq 0.13, \quad 0.05 \leq \xi_N^T \leq 0.14. \quad (9в)$$

Как видно в табл. 1, значения параметров ξ_N^λ , полученные путем подгонки температурных зависимостей теплопроводности кремния (см. ниже), находятся в интервале значений, следующих из оценок (9)–(9в).

Выражение для частоты релаксации фононов в процессах переброса имеет вид

$$\nu_{phU}^\lambda = B_U^\lambda \omega^2 T \exp\left(-\frac{C_\lambda}{T}\right), \quad (10)$$

где $C_\lambda = \Theta^\lambda/\alpha^\lambda$. Учитывая, что для кристаллов германия и кремния значения параметров α^λ одинаковы [6, 25] ($\alpha^T = 2.15$, $\alpha^L = 1.85$), а величины дебаевских температур $\Theta^L = 570$ К, $\Theta^T = 210$ К [6], для кремния получим $C^L = 308$ К, $C^T = 98$ К. Изменение параметра B_U можно грубо оценить следующим образом: в процессах переброса два из трех фононов имеют энергию порядка температуры Дебая $\Theta^{(i)}$. Поэтому $A_u^{(i)} \propto (\Theta^{(i)})^{-2}$ [1]. Из этого соотношения можно получить следующие оценки:

$$A_U^\lambda(\text{Si}) = \xi_U^\lambda A_U^\lambda(\text{Ge}), \quad \xi_U^\lambda \approx (\Theta_{\text{Ge}}^\lambda / \Theta_{\text{Si}}^\lambda)^2, \quad (11)$$

$$\xi_U^L \approx 0.34, \quad \xi_U^T \approx 0.32.$$

Параметр A_u можно оценить и другим образом. В области достаточно высоких температур, $T \sim (300-400)$ К, основной вклад в релаксацию импульса фононов вносят процессы фонон-фононного переброса. В этом случае из экспериментальных данных теплопроводности германия и кремния [6, 25] следует, что $\xi_U \approx 0.42$. Из аналитического вида теплопроводности при высоких температурах [16], $\kappa \propto M\Theta_D^3 V_0^{1/3} / \gamma^2 T$, следует, что

$$\xi_U \approx \frac{\kappa(\text{Ge})}{\kappa(\text{Si})} \approx \frac{M_{\text{Ge}}}{M_{\text{Si}}} \left(\frac{\Theta_D(\text{Ge})}{\Theta_D(\text{Si})} \right)^3 \frac{a_0^{\text{Ge}}}{a_0^{\text{Si}}} \approx 0.5. \quad (12)$$

Как видно в табл. 1, значения параметров ξ_U^λ , полученные из подгонки температурных зависимостей теплопроводности кремния [6, 25], находятся в интервале 0.3–0.5 и практически совпадают с оценкой, полученной из высокотемпературных данных теплопроводности германия и кремния с природным изотопическим составом [6, 25].

В [13] показано, что более удобно пользоваться параметрами, определяющими частоты релаксации в единицах с^{-1} . В табл. 2 приведены расчетные константы для германия и кремния.

Для значений подгоночных параметров, полученных в табл. 1, частота релаксации поперечных фононов в нормальных процессах на три порядка меньше, чем для продольных в кристаллах кремния:

$$\nu_{phN}^T [\text{с}^{-1}] \approx 2.6 \cdot 10^2 \left(\frac{T}{10} \right)^5 z_T, \quad (13)$$

$$\nu_{phN}^L [\text{с}^{-1}] \approx 4.1 \cdot 10^5 \left(\frac{T}{10} \right)^5 z_L^2.$$

При рассеянии на изотопическом беспорядке частота релаксации поперечных фононов почти в шесть раз больше ($S_*^3 \approx 6.2$), чем продольных:

$$\nu_{phi}^T [\text{с}^{-1}] \approx 35.7 \cdot 10^6 g \left(\frac{T}{10} \right)^4 z_T^4, \quad (14)$$

$$\nu_{phi}^L [\text{с}^{-1}] \approx 5.8 \cdot 10^6 g \left(\frac{T}{10} \right)^4 z_L^4,$$

где $g = 2.3 \cdot 10^{-6}$ для ^{28}Si (99.86 %) и $g = 2.01 \cdot 10^{-4}$ для кремния природного состава. При рассеянии на границах образца

$$\nu_{phB}^\lambda [\text{с}^{-1}] = \frac{s_\lambda}{L_C} \left\{ \frac{1-P}{1+P} + \frac{L_C}{l} \right\} = C_{B\lambda} \cdot 10^6, \quad (15)$$

$$C_{BL} = C_{BT} S_*,$$

где L_C — длина Казимира, l — длина образца, P — вероятность зеркального отражения фононов. Величина ν_{phB}^L в исследованных кристаллах кремния [6] составляла $(1-2) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$. Для скорости релаксации фононов в процессах переброса с помощью параметров табл. 1 получим

$$\nu_{phU}^\lambda [\text{с}^{-1}] = A_\lambda \left(\frac{T}{10} \right)^3 \exp\left(-\frac{C_\lambda}{T}\right) z_\lambda^2. \quad (16)$$

Нетрудно убедиться, что во всей температурной области для T -фононов выполняется неравенство $\nu_{phN}^T(q) \ll \nu_{phR}^T(q)$, и их вклад в теплопроводность определяется главным образом диффузионным движением. Однако для L -фононов отношение

$$\frac{\nu_{phN}^L}{\nu_{phR}^L} = \frac{0.41 \left(\frac{T}{10} \right)^5 z_L^2}{C_{BL} + \frac{35.7}{S_*^3} g \left(\frac{T}{10} \right)^4 z_L^4 + 3.77 \left(\frac{T}{10} \right)^3 \exp\left(-\frac{308}{T}\right) z_L^2} \quad (17)$$

при $T > 13$ К больше единицы, а в интервале температур $20 \text{ К} < T < 100 \text{ К}$ значительно больше единицы. Поэтому дрейфовое движение фононов в изотопически обогащенных кристаллах кремния в значительной мере определяет вклад продольных фононов в теплопроводность, которую с учетом приведенных выше неравенств можно представить в виде

$$\kappa^L(T) = \frac{1}{3} C_{VL} s_L^2 / \langle \nu_{phR} \rangle_L, \quad (18)$$

$$\langle \nu_{phR} \rangle_L = \{ \langle \nu_{phR}^L \rangle + 2S_*^5 \langle \nu_{phN}^T \rangle \} / J_L^{(4)}.$$

Из выражения (18) видно, что в эффективную частоту релаксации L -фононов для механизма релак-

сации Херринга (в отличие от обобщенной модели Каллавея [1–12]) вносят вклад не только резистивные процессы рассеяния L -фононов, но и нормальные процессы рассеяния T -фононов, роль которых значительно увеличивается за счет множителя S_*^5 . Это приводит к существенному подавлению дрейфового движения L -фононов и уменьшению максимальных значений теплопроводности для механизма релаксации Херринга в изотопически чистых кристаллах кремния.

Далее покажем, что изложенная процедура определения ангармонических параметров кремния позволяет удовлетворительно описать экспериментальные данные для природного кремния и обогащенного до 99.8588 % по изотопу ^{28}Si (SI284 [6]).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ С РАЗЛИЧНЫМ ИЗОТОПИЧЕСКИМ СОСТАВОМ

Ниже приведены результаты расчета теплопроводности $\kappa(T)$ образцов кремния с различной степенью изотопического содержания для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах согласно формулам (14), (15). Подгонка результатов осуществлялась вариацией параметров ангармонических релаксационных процессов, для того чтобы добиться наилучшего совпадения результатов расчета $\kappa(T)$ и экспериментальных данных как в области максимума $\kappa(T)$, так и при более низких температурах. Расчетные параметры, полученные с использованием результатов работ [1, 2, 6], приведены в табл. 1 и 2.

На рис. 1 приведены рассчитанные зависимости теплопроводности кристаллов кремния с содержанием изотопа ^{28}Si , равными 99.8588 % (SI284 [6]) (кривые $1H, 1S$), и кремния с природным содержанием изотопов [25] (кривые $2H, S$) для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах: по механизму Херринга (H) и согласно обобщенной модели Каллавея (S). Как видно на рисунке, различие результатов расчета для обоих вариантов релаксации фононов для кристаллов кремния природного состава пренебрежимо мало. Для кристалла ^{28}Si (99.86 %) положение максимумов теплопроводности для этих вариантов различается незначительно, в пределах погрешности эксперимента [6]. Максимальные значения теплопроводности $\kappa_{max}(T_{max})$ для обобщенной модели Каллавея заметно выше (на 11 %), чем для механизма Херринга. Однако вариацией параметров, связанных с ангармонизмом колебаний решетки (A_u^λ и A_N^λ), можно добиться согла-

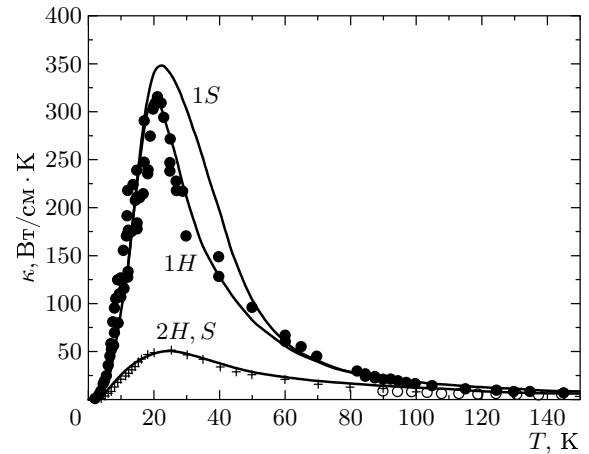


Рис. 1. Зависимости полной теплопроводности кристаллов кремния с различным изотопическим составом: 1 — с обогащением 99.86 % по изотопу ^{28}Si ($C_{BL} = 1.2$); 2 — с природным изотопическим составом ($C_{BL} = 1.8$) для двух механизмов релаксации импульса в нормальных процессах рассеяния фононов (H соответствует механизму Херринга, S — обобщенной модели Каллавея); символы — экспериментальные данные [2, 6]

сия рассчитанных и измеренных значений теплопроводности. Таким образом, экспериментальные данные [6] не позволяют сделать однозначный вывод в пользу одной из моделей, хотя согласно общепринятым представлениям [1, 15–18] в кристаллах кремния, как и в германии, основным механизмом релаксации тепловых фононов является механизм Херринга. Только анализ результатов экспериментальных [2] и рассчитанных в [13] зависимостей теплопроводности для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах для высокообогащенных кристаллов ^{70}Ge (99.99 %) позволил нам сделать однозначный вывод о том, что механизм Херринга в германии — не только доминирующий механизм нормальных процессов релаксации, но и эффективный фактор, ограничивающий максимальные величины теплопроводности в изотопически чистых кристаллах германия.

Ситуация качественно изменяется при дальнейшем уменьшении степени изотопического беспорядка. На рис. 2 приведены рассчитанные значения κ для кристаллов кремния с различным содержанием изотопа ^{28}Si . Как видно на рисунке, два варианта релаксации импульса фононов в нормальных процессах приводят к качественно различным результатам для изотопически обогащенных кристаллов кремния. При $g < 10^{-6}$ для обобщенной модели

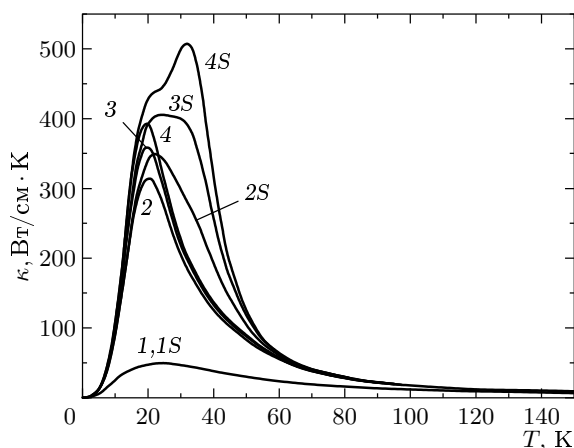


Рис. 2. Зависимость полной теплопроводности кристаллов кремния для механизма Херринга — кривые 1–4; для обобщенной модели Каллавея — кривые 1S, 2S, 3S, 4S. Кривые 1, 1S соответствуют кремнию природного состава и $g = 201 \cdot 10^{-6}$; кривые 2, 2S — Si284 [6] и $g = 2.33 \cdot 10^{-6}$; кривые 3, 3S соответствуют $g = 7 \cdot 10^{-7}$; кривые 4, 4S — моноизотопическому ^{28}Si и $g = 0$

Каллавея вклад L -фононов в максимальные значения полной теплопроводности κ_{max} резко возрастает с уменьшением степени изотопического беспорядка g , и при $g < 7 \cdot 10^{-7}$ значения κ_{max} определяются преимущественно L -фононами. Для механизма Херринга во всей области изменения параметра g ($g < 10^{-6}$) максимум теплопроводности определяется преимущественно T -фононами. Перераспределение импульса между L -фононами и T -фононами в нормальных процессах Херринга приводит к существенному подавлению дрейфового движения L -фононов и, соответственно, их вклада в $\kappa(T)$. Таким образом, нормальные процессы фонон-фононного рассеяния Херринга являются эффективным механизмом, ограничивающим максимальные значения теплопроводности изотопически обогащенных кристаллов кремния. При этом вид зависимости $\kappa(T)$ в окрестности максимума для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния при $g < 10^{-6}$ качественно различается: увеличение вклада L -фононов в области максимума теплопроводности $\kappa(T)$ приводит к изменению вида зависимости $\kappa(T)$. При $g \approx 7 \cdot 10^{-7}$ вклады L - и T -фононов становятся примерно одинаковыми и кривая $\kappa(T)$ для обобщенной модели Каллавея имеет широкий плоский максимум (кривая 3S). При $g \rightarrow 0$ для обобщенной модели Каллавея величина κ_{max} определяется главным образом L -фононами (кривая 4S), а

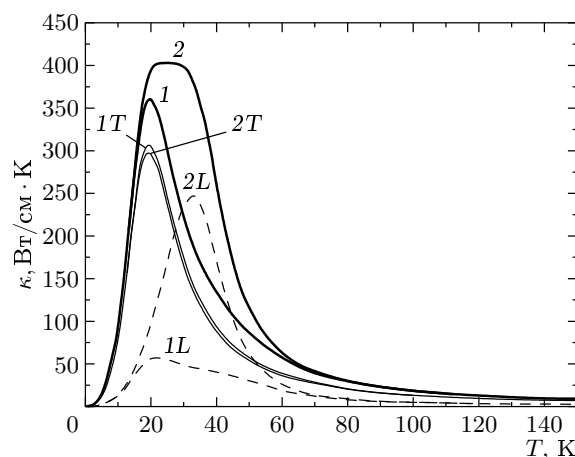


Рис. 3. Зависимость полной теплопроводности (кривые 1, 2), а также вкладов L - и T -фононов от температуры для кристалла кремния ($C_{BL} = 1.2$) при $g = 7 \cdot 10^{-7}$ для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах: кривая 1 — механизм Херринга, 2 — обобщенная модель Каллавея

температура T_{max} сдвигается более чем на 10 К по сравнению с вариантом Херринга (кривая 4). Такое различие в зависимостях $\kappa(T)$ в окрестности максимума для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния может быть проверено экспериментально.

На рис. 3 приведены рассчитанные зависимости теплопроводности и вкладов L - и T -фононов в $\kappa(T)$ для кристаллов кремния с $g = 7 \cdot 10^{-7}$ для обобщенной модели Каллавея (кривые 2, 2L, 2T) и для механизма Херринга (кривые 1, 1L, 1T). Как видно на рисунке, вклады поперечных фононов в κ для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах различаются незначительно (кривые 1T, 2T), поскольку они определяются в основном диффузионным движением фононов. Однако вклад L -фононов определяется дрейфовым движением, и для обобщенной модели Каллавея (кривая 2L) он примерно в 4.5 раз больше, чем для механизма Херринга (кривая 1L).

Существенно различаются и зависимости положений максимума теплопроводности $T_{max}(g)$ для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния в изотопически обогащенных кристаллах (см. рис. 4). Для механизма Херринга величина T_{max} уменьшается примерно с 22–23 К для кремния природного состава до 19 К для изотопически чистого кремния. Для обобщенной модели Каллавея с уменьшением изотопического беспоряд-

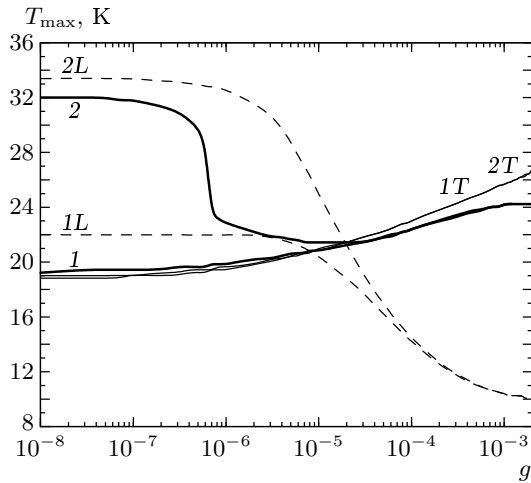


Рис. 4. Зависимости температуры максимума полной теплопроводности T_{max} от степени изотопического беспорядка g для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах рассеяния (кривая 1 соответствует механизму Херринга, 2 — обобщенной модели Каллавея) и вкладов L - и T -фононов

ка g величина T_{max} сначала уменьшается (для кремния природного состава $T_{max} \approx 22$ К) до значений $g \approx 10^{-5}$, а затем резко возрастает при $g \approx 7 \cdot 10^{-7}$. И для изотопически чистого кремния ($g = 0$) величина $T_{max} \approx 32$ К. Такое поведение $T_{max}(g)$ для обобщенной модели Каллавея связано с переходом от доминирующей роли T -фононов ($T_{max}^T(g)$) к доминирующей роли L -фононов ($T_{max}^L(g)$), максимум теплопроводности которых расположен при более высоких температурах (см. кривые $2L$ и $1T$). Это различие в поведении $T_{max}(g)$ для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния допускает возможность экспериментальной проверки.

Анализ вклада T -фононов в полную теплопроводность кристаллов кремния с различной степенью изотопического беспорядка показал (см. рис. 5), что L -фононы вносят основной вклад в теплопроводность кристаллов кремния природного изотопического состава (кривые $1H$, $1S$). В интервале температур от 15 К до 60 К этот вклад превышает 80% полной теплопроводности. Уменьшение степени изотопического беспорядка приводит к увеличению дрейфовой скорости продольных фононов и, соответственно, их вклада в теплопроводность. Для изотопически обогащенных кристаллов ^{28}Si (99.86%) (кривые $2H$, $2S$) относительный вклад T -фононов в $\kappa(T)$ уменьшается для обеих моделей: до 67% при температуре 40 К для механизма Херринга и до 44%

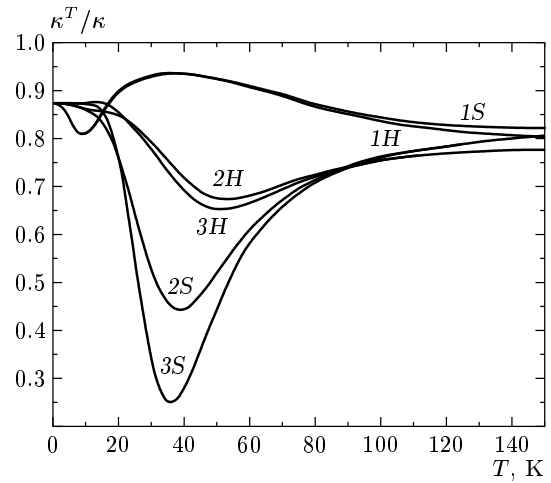


Рис. 5. Зависимости отношения вкладов T -фононов к полной теплопроводности для образцов кремния с различной степенью изотопического беспорядка (кривая 1 соответствует кремнию природного состава; 2 — ^{28}Si (99.86%); 3 — моноизотопический ^{28}Si), рассчитанные для модели Херринга (H) и обобщенной модели Каллавея (S)

при температуре 38 К для обобщенной модели Каллавея. Для изотопически чистого ^{28}Si ($g = 0$) (кривые $3H$ и $3S$) вклад T -фононов в $\kappa(T)$ для механизма Херринга уменьшается незначительно (на 2%) по сравнению с ^{28}Si (99.86%) и составляет 65% от полной теплопроводности. Для обобщенной модели Каллавея в этом случае вклад T -фононов уменьшается до 25% от полной теплопроводности.

Рассмотрим теперь отношение дрейфового вклада к диффузионному $\kappa_2^\lambda/\kappa_1^\lambda$ в теплопроводность кремния с различной степенью изотопического беспорядка для обеих ветвей фононного спектра. Как видно на рис. 6, для механизма Херринга вклад дрейфового движения L -фононов в теплопроводность образца ^{28}Si (99.86%) в области максимума уменьшается примерно в два с половиной раза по сравнению с результатом, полученным для обобщенной модели Каллавея. Однако и в этом случае он на два порядка превышает вклад диффузионного движения L -фононов. Заметим, что вклад дрейфового движения L -фононов в теплопроводность кремния с содержанием 99.86% изотопа ^{28}Si для механизма Херринга достигает максимума при температуре 52 К, в этом случае он превышает диффузионный вклад на два порядка. С другой стороны, вклад дрейфового движения T -фононов в области максимума теплопроводности составляет величину порядка 1% от полной теплопроводности κ^T для

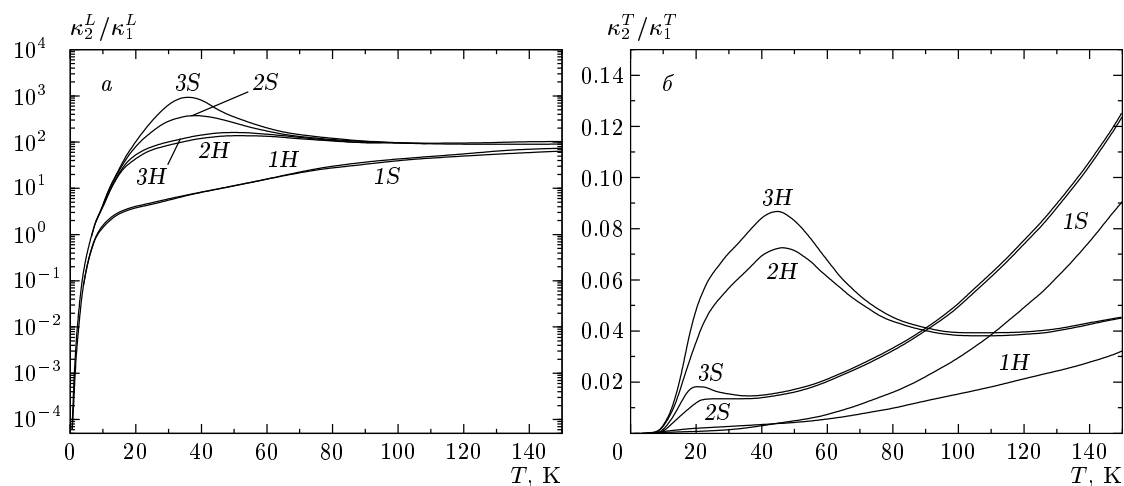


Рис. 6. Зависимости отношения дрейфового вклада в теплопроводность к диффузионному $\kappa_2^\lambda/\kappa_1^\lambda$ для L -фононов (а) и T -фононов (б) в кристаллах кремния с различной степенью изотопического беспорядка: кривая 1 соответствует кремнию природного состава; 2 — ^{28}Si (99.86 %); 3 — моноизотопический ^{28}Si для обобщенной модели Каллавея (S) и модели Херринга (H)

обобщенной модели Каллавея и около 4% для механизма Херринга. Для изотопически чистого ^{28}Si (кривые 3S и 3H) дрейфовое движение T -фононов вносит малый вклад в теплопроводность для обоих вариантов релаксации фононов в нормальных процессах. Однако для механизма Херринга в окрестности максимума он в три раза больше, что связано с перекачкой дрейфового импульса от продольных фононов к поперечным в нормальных процессах Херринга. С другой стороны, вклад дрейфового движения L -фононов в теплопроводность кристаллов ^{28}Si превышает диффузионный почти на три порядка для обобщенной модели Каллавея. Перераспределение дрейфового импульса от L -фононов к T -фононам в нормальных процессах Херринга снижает этот вклад почти на порядок, хотя и в этом случае он на два порядка превышает диффузионный. С ростом степени изотопического беспорядка отношение $\kappa_2^\lambda/\kappa_1^\lambda$ для обеих ветвей фононного спектра уменьшается и различие между обобщенной моделью Каллавея и механизмом Херринга для кремния природного изотопического состава становится пренебрежимо малым.

Рисунок 7 иллюстрирует зависимости максимальных значений теплопроводности кремния κ_{max} от степени g изотопического беспорядка для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах при тех же значениях граничного рассеяния, что и в [6] ($C_{BL} = 1.2$). Как видно на рисунке, эти зависимости при малых значениях g су-

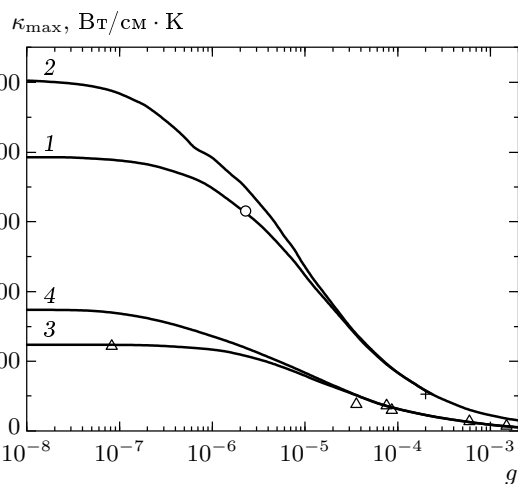


Рис. 7. Зависимости максимальных значений теплопроводности κ_{max} от степени изотопического беспорядка g для кристаллов кремния (кривые 1, 2) и германия (кривые 3, 4) для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах рассеяния (кривые 1, 3 — модель Херринга; кривые 2, 4 — обобщенная модель Каллавея). Символы — экспериментальные значения: \circ — ^{28}Si (99.86 %) [6], $+$ — кремний природного состава [25], Δ — кристаллы германия с различным изотопическим составом [2, 5]

щественно различаются. Для механизма Херринга величины $\kappa_{max}(g)$ практически достигают насыщения (кривая 1) при значениях g , меньших $7 \cdot 10^{-7}$

(что соответствует содержанию изотопа ^{28}Si , равному 99.96 %). Для обобщенной модели Каллавея (кривая 2) при значениях g , меньших $7 \cdot 10^{-7}$, величина κ_{max} продолжает увеличиваться. Если исходить из экспериментальных данных [6] для ^{28}Si (99.86 %) и оценок, приведенных в данной работе, то в моноизотопическом ^{28}Si максимальная величина теплопроводности для механизма Херринга будет равна $\kappa_{max}(g = 0) \approx 393$ Вт/см·К, т.е. можно добиться увеличения теплопроводности на 25 % по сравнению с ^{28}Si (99.86 %). При $g = 10^{-7}$ (что соответствует содержанию изотопа ^{28}Si , равному 99.99 %) максимальная величина теплопроводности всего лишь на 1.4 % меньше, чем $\kappa_{max}(g = 0)$, а при $g = 7 \cdot 10^{-7}$ величина κ_{max} меньше, чем $\kappa_{max}(g = 0)$, на 8.6 %. Поэтому предел изотопического обогащения кремния ^{28}Si (99.99 %) можно считать оптимальным для получения максимальных величин теплопроводности. Очевидно, что нормальные процессы фонон-фононного рассеяния Херринга являются эффективным механизмом, ограничивающим максимальные значения теплопроводности изотопически обогащенных кристаллов кремния.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, в данной работе проведен детальный анализ решеточной теплопроводности кристаллов кремния с различным изотопическим составом. На основании экспериментальных данных для кремния природного состава и ^{28}Si (99.86 %) найдены значения параметров, определяющих релаксацию импульса фононов в ангармонических процессах рассеяния. Рассмотрены два варианта релаксации импульса фононов в нормальных процессах фонон-фононного рассеяния. Результаты расчета теплопроводности кремния природного состава и ^{28}Si (99.86 %) для механизма релаксации Херринга находятся в хорошем количественном согласии с экспериментом. Показано, что для образца ^{28}Si (99.86 %) ($g = 2.33 \cdot 10^{-6}$) еще не достигнуто значение параметра изотопического беспорядка ($g \approx 7 \cdot 10^{-7}$), при котором два варианта релаксации фононов в нормальных процессах дают качественно различные результаты.

Проведенный анализ показал, что зависимости теплопроводности для обобщенной модели Каллавея и предложенной нами модели, основанной на особенностях релаксации фононов в нормальных процессах Херринга, качественно различаются для изотопически обогащенных кристаллов ^{28}Si (99.96 %) при $g < 7 \cdot 10^{-7}$. В этом случае максимальные значения теплопроводности κ_{max} определяются, главным образом, T -фононами для

механизма Херринга, тогда как для обобщенной модели Каллавея — преимущественно L -фононами. При этом зависимости $\kappa(T)$ в окрестности максимума для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния при $g < 10^{-6}$ качественно различаются, а положения максимумов теплопроводности для обобщенной модели Каллавея оказываются сдвинутыми примерно на 10 К в сторону больших температур относительно температур, полученных согласно механизму Херринга. Такие различия в поведении $T_{max}(g)$ и зависимостей $\kappa(T)$ в окрестности максимума для двух вариантов релаксации фононов в нормальных процессах рассеяния допускают возможность экспериментальной проверки.

Рассчитаны зависимости максимальных значений теплопроводности кремния $\kappa_{max}(g)$ от степени g изотопического беспорядка для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах. Показано, что для моноизотопического кристалла ^{28}Si с параметрами граничного рассеяния такими же, как и для образца ^{28}Si (99.86 %) [6], величина $\kappa_{max}(g = 0) \approx 393$ Вт/см·К, а $T_{max} \approx 19.2$ К (модель Херринга) и $\kappa_{max}(g = 0) \approx 505$ Вт/см·К, а $T_{max} \approx 32$ К (обобщенная модель Каллавея). Поскольку для кристаллов кремния доминирующим механизмом нормальных процессов рассеяния фононов является механизм Херринга, основываясь на результатах данного анализа, можно полагать, что максимальные значения теплопроводности кремния могут быть увеличены на 25 % по сравнению с достигнутыми для ^{28}Si (99.86 %) [6]. Следует отметить, что при $g \approx (1-2) \cdot 10^{-7}$ функция $\kappa_{max}(g)$ достигает насыщения, и значения $\kappa_{max}(g)$ всего лишь на (1-2) % меньше, чем $\kappa_{max}(g = 0)$. Поэтому при обогащении кремния от 99.86 % до 99.99 % можно добиться увеличения максимальных значений теплопроводности кремния на 24 % для образцов тех же размеров и той же поверхностной обработки. Заметим, что наши оценки относятся к химически чистым совершенным кристаллам кремния. Наличие примесей, в особенности электрически заряженных, может существенно снизить величины κ_{max} .

Авторы выражают благодарность Т. Руфу (Т. Ruf) за предоставление экспериментальных данных, А. В. Инюшкину за обсуждение проблем, затронутых в настоящей работе, А. П. Танкееву за обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 00-02-16299).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. П. Жернов, А. В. Инюшкин, *Изотопические эффекты в твердых телах*, Российский научный центр «Курчатовский Институт», Москва (2001).
2. M. Asen-Palmer, K. Bartkowski, E. Gmelin, M. Cardona, A. P. Zhernov, A. V. Inyushkin, A. N. Taldenkov, V. I. Ozhogin, K. M. Itoh, and E. E. Haller, *Phys. Rev. B* **56**, 9431 (1997).
3. В. И. Ожогин, А. В. Инюшкин, А. Н. Талденков, А. В. Тихомиров, Г. Э. Попов, Ю. Халлер, К. Ито, *Письма в ЖЭТФ* **63**, 463 (1996).
4. А. Н. Талденков, А. В. Инюшкин, В. И. Ожогин, К. М. Itoh, and E. E. Haller, *Труды IV конференции «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул»*, Звенигород 1999, Наука, Москва (1999).
5. T. H. Geballe and G. W. Hull, *Phys. Rev.* **110**, 1773 (1958).
6. T. Ruf, R. W. Henn, M. Asen-Palmer, E. Gmelin, M. Cardona, H.-J. Pohl, G. G. Devyatych, and P. G. Sennikov, *Sol. St. Comm.* **115**, 243 (2000).
7. R. Berman, *Phys. Rev. B* **45**, 5726 (1992).
8. W. S. Capinski, H. J. Maris, E. Bauser, I. Silier, M. Asen-Palmer, T. Ruf, M. Cardona, and E. Gmelin, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2109 (1997).
9. Lanhua Wei, P. K. Kuo, R. L. Thomas, T. R. Anthony, and W. F. Banholzer, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3764 (1993).
10. J. E. Graebner, M. E. Reiss, L. Seibles, T. M. Hartnett, R. P. Miller, and C. J. Robinson, *Phys. Rev. B* **50**, 3702 (1994).
11. J. R. Olson, R. O. Pohl, J. W. Vandersande, A. Zolten, T. R. Anthony, and W. F. Banholzer, *Phys. Rev. B* **47**, 14850 (1993).
12. А. П. Жернов, Д. А. Жернов, *ЖЭТФ* **114**, 1757 (1998); А. П. Жернов, *ФТТ* **41**, 1185 (1999).
13. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, *ЖЭТФ* **120**, 649 (2001).
14. J. Callaway, *Phys. Rev.* **113**, 1046 (1959).
15. Р. Берман, *Теплопроводность твердых тел*, Мир, Москва (1962).
16. Б. М. Могилевский, А. Ф. Чудновский, *Теплопроводность полупроводников*, Наука, Москва (1972).
17. В. С. Оскотский, И. А. Смирнов, *Дефекты в кристаллах и теплопроводность*, Наука, Ленинград (1972), с. 205.
18. Baxter H. Armstrong, *Phys. Rev. B* **32**, 3381 (1985).
19. J. A. Krumhansl, *Proc. Phys. Soc.* **85**, 921 (1965).
20. M. G. Holland, *Phys. Rev.* **132**, 2461 (1963).
21. K. Itoh, *Low Temperature Carrier Transport Properties in Isotopically Controlled Germanium*, Ph. D. Thesis, University of California at Berkeley (1994).
22. И. Г. Кулеев, *ФТТ* **44**, 215 (2002).
23. C. Herring, *Phys. Rev.* **95**, 954 (1954).
24. S. Simons, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 401 (1963); **83**, 749 (1964).
25. G. A. Slack and C. J. Glassbrenner, *Phys. Rev.* **120**, 782 (1960).
26. В. Труэлл, Ц. Эльбаум, Б. Чик, *Ультразвуковые методы в физике твердого тела*, Мир, Москва (1972).
27. G. Nilsson and G. Nelin, *Phys. Rev. B* **6**, 3777 (1972).
28. J. P. Srivastava, *J. Phys. Chem. Sol.* **41**, 357 (1980).