

АНИЗОТРОПИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОПЛЕНОК И НАНОПРОВОДОВ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев*

*Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 26 февраля 2014 г.

Исследовано влияние фокусировки фононов на фононный транспорт в монокристаллических нанопленках и нанопроводах в режиме граничного рассеяния. Проанализированы зависимости теплопроводности и длин свободного пробега фононов от геометрических параметров наноструктур с различной анизотропией упругой энергии при диффузном рассеянии фононов на границах. Показано, что анизотропия теплопроводности для наноструктур из кубических кристаллов с положительной (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) и отрицательной (CaF₂, NaCl, YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка качественно различается как для нанопленок, так и для нанопроводов. Определены ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальную или минимальную теплопроводность в плоскости пленки для кристаллов обоих типов. Для нанопроводов с квадратным сечением величины теплопроводности зависят главным образом от направления теплового потока, а в достаточно широких нанопленках они в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки.

DOI: 10.7868/S0044451014090120

1. ВВЕДЕНИЕ

Большой интерес в последнее десятилетие вызывают исследования фононного транспорта в нанопленках и нанопроводах [1–4]. Он связан с широким использованием наноструктур в микроэлектронике. Длины свободного пробега фононов для них в широком температурном интервале оказываются больше или сравнимы с характерными размерами наноструктур. Поэтому рассеяние фононов на границах играет важную роль в теплосопропротивлении и приводит к значительному уменьшению теплопроводности наноструктур по сравнению с величинами в объемных материалах. Для объемных кристаллов кремния [5] граничное рассеяние фононов вносит заметный вклад в теплосопропротивление при температурах, меньших 30–40 К, однако для кремниевых нанопленок толщиной 50 нм, согласно оценкам [6, 7], оно остается эффективным вплоть до комнатных температур.

В настоящей работе мы рассмотрим особенности фононного транспорта в наноструктурах с различным типом упругой анизотропии в рамках феноменологического подхода Казимира – МакКарди [5, 8]. 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.

Впервые задачу о теплопроводности диэлектрического цилиндра бесконечной длины в этой модели рассмотрел Казимир [8]. Он показал, что в модели изотропной среды длина пробега фононов равна диаметру цилиндра. Позже в работах [9] было рассмотрено влияние частично зеркального отражения фононов от поверхности образца и его конечной длины на теплопроводность в режиме граничного рассеяния. В частности, было показано, что учет конечной длины приводит к уменьшению теплопроводности по сравнению с бесконечным образцом. Согласно [10, 11], диффузный характер рассеяния фононов реализуется, если геометрические параметры шероховатостей на границе образца будут больше или

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

сравнимы с длиной волны фонона. Следует отметить, что перед измерением теплопроводности объемные образцы кремния предварительно обрабатывались наждаком [5], для того чтобы обеспечить полностью диффузное рассеяние фононов границами.

Основной задачей настоящей работы является анализ влияния анизотропии упругой энергии на фононный транспорт в монокристаллических нанопленках и нанопроводах при диффузном рассеянии фононов на границах. Известно [12–15], что анизотропия упругой энергии кубических кристаллов приводит к неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононов и к их фокусировке. Экспериментальные исследования [5] показали, что при достаточно низких температурах, когда длина свободного пробега фононов превышает поперечный размер образца, фокусировка фононов приводит к двум эффектам в теплопроводности объемных кристаллов Si и CaF₂. Первым эффектом является зависимость теплопроводности от направления теплового потока: для образцов Si с квадратным сечением в направлении [100] она оказалась на 50 % больше, чем в направлении [111], а для CaF₂ — наоборот: для направления [111] она оказалась на 40 % больше, чем для направления [100].

Вторым эффектом, является зависимость теплопроводности от ориентации боковых граней образца. Для двух одинаковых образцов с прямоугольным сечением и градиентом температуры в направлении [110] теплопроводность для образца с широкой гранью {100} оказалась на 33 % выше, чем для образца с широкой гранью {110}. Поэтому для корректного описания анизотропии теплопроводности $\kappa(T)$ и длин свободного пробега Λ в монокристаллических наноструктурах следует ввести два ориентационных параметра. Эти параметры учитывают зависимости кинетических характеристик от направления $[I(\psi)]$ теплового потока, где угол ψ определяет его направление для выбранного сечения кубического кристалла с ориентацией $\{J\}$ относительно осей кристалла. Поэтому, в отличие от изотропной среды, они могут быть представлены в виде

$$\kappa(T) \Rightarrow \kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}, \quad \Lambda \Rightarrow \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}.$$

Ниже будет показано, что ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока.

Предложенный метод учета фокусировки фононов является актуальным, поскольку в значительном числе публикаций, посвященных исследованию фононного транспорта в пленках и нанопроводах,

эти эффекты не учитывались. Так, например, в работах [6, 15, 16] для граничного рассеяния в наноструктурах на основе кремния и алмаза использовалась теория Казимира [8], справедливая только для модели изотропной среды. А при изложении экспериментальных результатов в обзорах [1–3] не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей. Нами будет показано, что изменение ориентации плоскости пленки может приводить к изменению значений теплопроводности в 2–3 раза. Поэтому отсутствие такой информации делает эти данные практически бесполезными. Следует отметить, что ориентационные зависимости теплопроводности определяются типом анизотропии упругой энергии.

Для количественной характеристики упругой анизотропии кубических кристаллов ранее формально вводился фактор анизотропии [17]

$$A = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12}),$$

где c_{ij} — упругие модули второго порядка. В работе [18] показано, что влияние анизотропии упругой энергии на спектр и векторы поляризации колебательных мод определяется безразмерным параметром

$$k - 1 = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11})/(c_{11} - c_{44}).$$

В зависимости от знака параметра $k - 1$ все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной, $k - 1 > 0$ (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG), и отрицательной, $k - 1 < 0$ (CaF₂, NaCl, YIG), анизотропией упругих модулей второго порядка (см. табл. 1). Для изотропных сред параметр $k = 1$. Вид спектра и поведение векторов поляризации колебательных мод для кристаллов первого ($k - 1 > 0$) и второго типа ($k - 1 < 0$) качественно различаются (подробнее см. [18]). Проведенный нами анализ показал, что направления фокусировки фононов для каждой из акустических мод в кристаллах одного типа совпадают, тогда как для кристаллов разного типа они различаются. Это должно приводить к качественному различию анизотропии теплопроводности в кристаллах разного типа.

Целью настоящей работы является исследование анизотропии теплопроводности в режиме граничного рассеяния и ее зависимостей от геометрических параметров для наноструктур из кристаллов первого и второго типа. К сожалению, при исследовании теплопроводности наноструктур [1–4] не были рассмотрены такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости длин пробега фононов от геометрических

Таблица 1. Упругие модули второго порядка c_{ij} [10^{12} дин/см²], плотность ρ [г/см³] и параметр анизотропии $k - 1$ для исследованных кубических кристаллов

Соединение	c_{11}	c_{12}	c_{44}	ρ	$k - 1$
GaAs [19]	1.1904	0.5384	0.5952	5.317	0.90
Ge [20]	1.289	0.483	0.671	5.32	0.87
LiF [21]	1.246	0.424	0.649	2.646	0.78
Si [22]	1.677	0.65	0.804	2.3301	0.67
Алмаз [23]	10.76	1.25	5.76	3.512	0.40
YAG [24]	3.281	1.064	1.137	4.55	0.03
NaCl [25]	0.575	0.099	0.133	2.214	-0.48
CaF ₂ [26]	1.74	0.56	0.359	3.211	-0.33
YIG [24]	2.69	1.077	0.764	5.17	-0.04

параметров пленок, от направлений теплового потока и ориентации плоскости пленки относительно осей кристалла. Решение этих проблем позволяет определить ориентации плоскостей пленок и направлений потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов полупроводниковых микросхем. Эти проблемы являются актуальными для полупроводниковых пленок, широко используемых в микроэлектронике [1–4, 27–29] и являются предметом изучения настоящей работы.

В работах [30, 31] нами были получены аналитические решения задачи о диффузном рассеянии фононов на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями и определены релаксационные функции с учетом фокусировки фононов. Эти решения позволили объяснить оба эффекта в теплопроводности объемных кристаллов Si в работе [32] и согласовать температурные зависимости теплопроводности с экспериментальными данными [5] во всем исследованном интервале температур. Использование результатов работ [30, 31], а также параметров ангармонического рассеяния, найденных в [32] для объемных кристаллов Si, позволило адекватно описать температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов диаметрами 56 и 115 нм в температурном интервале от 20 до 300 К. Однако в работе [7] (в отличие от [32]) для согласования результатов расчета с экспериментальными данными [4] нам пришлось учесть частичную зеркальность отражения фононов от границ нанопроводов.

Итак, результаты работ [7, 32] свидетельствуют

о том, что аналитические решения [30, 31], вполне обоснованы и согласуются с экспериментальными данными [4, 5]. Здесь они использованы для анализа влияния анизотропии упругой энергии на зависимости длин пробега фононов в монокристаллических нанопленках и нанопроводах от геометрических параметров и направлений теплового потока. Показано, что изменение направлений фокусировки фононов при переходе от наноструктур из кристаллов первого типа ко второму типу приводит к качественному изменению анизотропии теплопроводности в режиме граничного рассеяния. Так, например, в достаточно широких пленках с ориентацией плоскости {100} длины пробега фононов в кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge и Si) имеют максимальные величины, тогда как в кристаллах второго типа (CaF₂ и NaCl) — минимальные.

2. ДЛИНЫ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУРАХ

Проанализируем фононный транспорт в пленках длины L , имеющих прямоугольное сечение со сторонами D (толщина) и $W = \mu D$ (ширина). Исследуем теплопроводность наноструктур в режиме граничного рассеяния, когда теплосоппротивление обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. Рассмотрим область температур, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), когда применима модель анизотропного континуума. Из выражения для теплопроводности

$$\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = \frac{1}{3} C_V(T) \bar{S} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T)$$

следует, что анизотропия теплопроводности определяется длиной свободного пробега фононов, поскольку удельная теплоемкость C_V и средняя скорость фонона \bar{S} не зависят от направления потока тепла. Средние длины пробега Λ фононов, а также длины пробега Λ^λ фононов с поляризацией λ при диффузном рассеянии фононов на границах определены в работах [30, 31]. С учетом фокусировки фононов для направления $[I(\psi)]$ потока тепла и ориентации $\{J\}$ широкой грани пленки относительно осей кристалла их можно представить в виде

$$\Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \frac{3}{4\pi} \frac{1}{\sum_{\lambda 1} \langle (S^{\lambda 1})^{-2} \rangle} \times \sum_{\lambda} \int d\Omega_q \frac{I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^3}, \quad (1)$$

$$\Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \frac{3}{4\pi} \frac{1}{\langle (S^\lambda)^{-2} \rangle} \int d\Omega_q \frac{I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^3},$$

где λ — индексы поляризации ($\lambda = l$ соответствует продольным фононам, а $\lambda = t_1$ и $\lambda = t_2$ — «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным ко-

лебательным модам), $d\Omega_q = \sin\theta d\theta d\varphi$, $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$, θ и φ — угловые переменные вектора \mathbf{q} . В системе координат по ребрам куба фазовые скорости $S^\lambda(\theta, \varphi)$ определены в работе [18]. Релаксационные функции $I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)$ для пленок с прямоугольным сечением при выполнении неравенств

$$\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|, \quad \left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g1}^\lambda} \right| \geq k_0 \equiv \frac{L}{2D}$$

или

$$\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|, \quad \left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g2}^\lambda} \right| \geq \frac{k_0}{\mu}$$

определяются выражениями [31]

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

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 $I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)$ определяются выражениями для образцов бесконечной длины

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

Здесь $V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{g1}^\lambda(\theta, \varphi)$ и $V_{g2}^\lambda(\theta, \varphi)$ — проекции групповой скорости на направления соответственно градиента температуры, сторону D и сторону W . Для образцов с квадратным сечением [30] достаточно в формулах (2), (3) положить $\mu = 1$.

Проанализируем зависимости длин пробега фононов от геометрических и ориентационных 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 потока. Определим систему ко-

ординат с осью «3» вдоль направления теплового потока. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно плоскости пленки, она определяет ориентацию $\{J\}$ плоскости. Ось «2» направим перпендикулярно двум узким боковым граням пленки. Тогда компоненты групповой скорости фононов для первого случая могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} V_{g3}^\lambda &= -V_{gy}^\lambda \sin\psi + V_{gz}^\lambda \cos\psi, \\ V_{g2}^\lambda &= V_{gy}^\lambda \cos\psi + V_{gz}^\lambda \sin\psi, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda, \end{aligned} \quad (4)$$

для второго —

$$\begin{aligned} V_{g3}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin\psi + V_{gz}^\lambda \cos\psi, \\ V_{g2}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos\psi - V_{gz}^\lambda \sin\psi, \quad (5) \\ V_{g1}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda), \end{aligned}$$

а для третьего —

$$\begin{aligned}
 V_{g3}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{gx}^\lambda - V_{gy}^\lambda) \sin \psi + \\
 &+ \sqrt{\frac{2}{3}} \left(-\frac{V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda}{2} + V_{gz}^\lambda \right) \cos \psi, \\
 V_{g2}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi + \\
 &+ \sqrt{\frac{2}{3}} \left(-\frac{V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda}{2} + V_{gz}^\lambda \right) \sin \psi, \\
 V_{g1}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{3}} (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda + V_{gz}^\lambda).
 \end{aligned} \tag{6}$$

Зависимость направления теплового потока от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^λ . Проекция групповой скорости V_{g1}^λ не зависит от угла ψ , поскольку является осью вращения (см. формулы (4)–(6)). Итак, формулы (1)–(6) позволяют анализировать особенности фононного транспорта в нанопленках и нанопроводах при низких

температурах. Необходимым условием правомерности такого подхода является применимость модели анизотропного континуума для анализа фононного транспорта в наноструктурах. В работе [4] показано, что для нанопроводов диаметрами 56 и 115 нм в интервале температур от 20 до 60 К теплопроводность следовала зависимости $\kappa(T) \propto T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому для нанопленок толщиной более 50 нм теория, развитая в этой работе, применима в достаточно широкой низкотемпературной области.

В изотропных средах фазовые скорости S^λ фононов не зависят от углов θ и φ . Поэтому из формул (1)–(3) следует, что длины пробега фононов различных поляризаций равны друг другу и средней длине пробега:

$$\Lambda^t = \Lambda^l = \Lambda = D \frac{3}{4\pi} \int d\Omega_q \tilde{I}(\theta, \varphi),$$

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{DS^\lambda},$$

$$\tilde{I}(\theta, \varphi) = k_0 |n_3| \left\{ 1 - \frac{k_0}{2\mu} \frac{|n_2| + \mu|n_1|}{|n_3|} + \frac{(k_0)^2}{3\mu} \frac{|n_1||n_2|}{n_3^2} \right\} \quad \text{при} \begin{cases} (\mu|n_1| > |n_2| \quad \text{и} \quad |n_3/n_1| \geq k_0) \\ \text{или} \\ (\mu|n_1| < |n_2| \quad \text{и} \quad |n_3/n_2| \geq k_0/\mu), \end{cases} \tag{7}$$

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

Здесь n_1, n_2 и n_3 — компоненты единичного волнового вектора \mathbf{n} . Как видно из выражений (7), длины пробега фононов в изотропных средах не зависят от упругих модулей, а определяются полностью геометрическими параметрами образцов. Однако в упруго-анизотропных кристаллах они различны для фононов разных поляризаций и зависят от направления теплового потока в кристалле. Из выражения (7) следует результат Смолуховского [33] для длины пробега молекул при течении разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с прямоугольным сечением ($a \times b$):

$$\begin{aligned}
 \Lambda &= \frac{3}{4} \sqrt{ab} \left\{ \sqrt{\frac{a}{b}} \ln \left[\frac{b}{a} + \sqrt{1 + \left(\frac{b}{a}\right)^2} \right] + \sqrt{\frac{b}{a}} \times \right. \\
 &\quad \times \ln \left[\frac{a}{b} + \sqrt{1 + \left(\frac{a}{b}\right)^2} \right] + \frac{1}{3} \times \\
 &\quad \left. \times \left[\sqrt{\left(\frac{a}{b}\right)^3} + \sqrt{\left(\frac{b}{a}\right)^3} - \sqrt{\left(\frac{a}{b} + \frac{b}{a}\right)^3} \right] \right\}. \tag{8}
 \end{aligned}$$

Из формулы (8) для кнудсеновского течения фононного газа по бесконечному стержню с прямоугольным сечением ($a = D$ и $b = W = \mu D$) получаем

результат МакКарди и др. [5] для длины Казимира:

$$\begin{aligned}
 \Lambda_C &= \frac{3D}{4} \left\{ \ln \left[\mu + \sqrt{1 + \mu^2} \right] + \right. \\
 &\quad + \mu \ln \left[\frac{1}{\mu} + \sqrt{1 + \frac{1}{\mu^2}} \right] + \\
 &\quad \left. + \frac{1}{3} \left[\left(\frac{1}{\mu} + \mu^2 \right) - \sqrt{\mu \left(\frac{1}{\mu} + \mu \right)^3} \right] \right\}. \tag{9}
 \end{aligned}$$

Для теплопроводности цилиндрического стержня бесконечной длины диаметром d в модели изотропной среды следует результат Казимира [8]: $\Lambda_C = d$, что совпадает с результатом Кнудсена [34] для течения разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с круглым сечением. Эти совпадения не являются случайными. Займан в монографии [10, с. 415] подчеркнул: «Эти рассуждения (как, впрочем, и вся теория рассеяния на границах) точно такие же, как и в случае потока сильно разреженного газа через трубку (Кнудсен [344], Смолуховский [615])». Поэтому режим граничного рассеяния получил название кнудсеновского течения фононного газа [10].

Из формул (1)–(3) следует, что коэффициенты теплопроводности $\tilde{\kappa}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = \kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T)/D$ и, соответственно, длины свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(L, W, D)/D$, нормированные на толщину пленки D , зависят не от трех геометрических параметров образца (D, W, L) , а только от двух отношений, параметров $\mu = W/D$ и $k_0 = L/2D$:

$$\begin{aligned}\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T, L, W, D) &= D\tilde{\kappa}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T, k_0, \mu), \\ \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(L, W, D) &= D\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(k_0, \mu).\end{aligned}\quad (10)$$

Очевидно, что для образцов с квадратным сечением длины пробега фононов, нормированные на сторону сечения D , зависят только от параметра k_0 ($\Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(L, D, D) = D\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(k_0)$). Формулы (10) представляют интерес для экспериментальной проверки применимости теории [5] при исследовании фононного транспорта в упруго-анизотропных кристаллах.

3. ЗАВИСИМОСТИ ДЛИН СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ ОТ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НАНОСТРУКТУР

Рассмотрим особенности фононного транспорта в монокристаллических пленках при низких температурах. Прежде чем переходить к анализу влияния упругой анизотропии наноструктур на длины пробега фононов, отметим, что для их оценок в монокристаллических пленках кубической симметрии, как правило, использовались теория Казимира и модель изотропной среды [6, 15, 16]. В качестве примера можно привести работу [15], в которой сделана попытка определить длины пробега фононов в нанопленках и нанопроводах при низких температурах, исходя из результатов Казимира и соображений размерности. Авторы работы [15] предполагали, что длина пробега фононов в пленке зависит только от толщины пленки, а цилиндрический стержень, рассмотренный Казимиром, является одномерной системой. Поскольку для цилиндрического стержня длина Казимира $\Lambda_C = 1D$ (здесь D — диаметр стержня), а пленка является двумерной структурой, авторы работы [15] постулировали, что для теплового потока вдоль пленки длина Казимира равна удвоенной толщине, $\Lambda_C = 2D$ (здесь D — толщина пленки), т. е. она не зависит ни от ширины, ни от длины пленки. Эти результаты использовались [15] для анализа температурных зависимостей теплопроводности в кремниевых нанопленках и нанопроводах. В связи с этим «результатом» в работе Мариса и Та-

муры [6] была рассмотрена теплопроводность тонких пленок бесконечной длины в модели изотропного континуума и было указано на ошибочность этого результата. Было показано, что длины Казимира не только существенным образом зависят от ширины пленки, но и, более того, они логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности. Эта расходимость для пленок в модели изотропной среды отмечалась и ранее [35]. Действительно, из формулы (8) следует результат [6, 35]

$$\begin{aligned}\tilde{\Lambda}_C(\mu) &= \Lambda_C(\mu)/D \approx A + B \ln \mu, \\ \mu \gg 1, A &\approx 0.895, \quad B = 0.75,\end{aligned}\quad (11)$$

где $\Lambda_C(\mu)$ — длина Казимира для пленки толщиной D и шириной μD . Как отмечалось в работах [6, 35], логарифмическая расходимость выражения (11) обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. Вопрос о влиянии конечной длины пленки на логарифмическую расходимость длин Казимира в работах [6, 35] не рассматривался. Также не исследовались такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров пленок и от направлений теплового потока. Эти проблемы являются актуальными для полупроводниковых пленок, широко используемых в микроэлектронике [1–4, 27–29].

Численный анализ теплопроводности с использованием выражений (1)–(6) показал, что длины Казимира для монокристаллических пленок также логарифмически расходятся, когда ширина пленки стремится к бесконечности. Однако их значения для фононов различных поляризаций, в отличие от изотропной среды, значительно различаются (рис. 1). Кривая 5а на этом рисунке соответствует результату Мариса и Тамуры [6] для длины Казимира в модели изотропной среды. Для нанопроводов с квадратным сечением длины Казимира в значительной степени определяются эффектом фокусировки фононов. Как видно из табл. 2, они достигают максимальных значений в направлениях фокусировки фононов. В этих направлениях они превышают длины пробега остальных колебательных мод, а также значение $\tilde{\Lambda}_{C\text{ iso}} \approx 1.115$ для изотропной среды. Так, например, $\tilde{\Lambda}_{C[111]}^l = 1.48$, $\tilde{\Lambda}_{C[110]}^{t_1} = 1.85$, $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^{t_2} = 2.49$ для германия. Длины Казимира достигают минимальных значений в тех направлениях дефокусировки, в которых они оказываются заметно меньше, чем для изотропных сред. Например, $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^l = 0.81$, $\tilde{\Lambda}_{C[111]}^{t_1} = 0.77$, $\tilde{\Lambda}_{C[110]}^{t_2} = 0.89$ для германия.

Таблица 2. Нормированные длины Казимира $\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^\lambda$ и $\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}$ в стержнях с квадратным сечением для симметричных направлений $[I(\psi)]$

Соединение	$k - 1$	$[I(\psi)]$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^l$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^{t_1}$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^{t_2}$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}$ [5]
GaAs	0.90	[100]	0.80	1.34	2.29	1.74	—
		[110]	1.25	1.73	0.89	1.25	—
		[111]	1.52	0.77	1.20	1.09	—
Ge	0.87	[100]	0.81	1.32	2.49	1.80	—
		[110]	1.24	1.85	0.89	1.29	—
		[111]	1.48	0.77	1.24	1.11	—
LiF	0.78	[100]	0.82	1.30	2.64	1.86	1.80
		[110]	1.22	1.93	0.89	1.33	1.28
		[111]	1.44	0.78	1.27	1.11	1.10
Si	0.67	[100]	0.84	1.30	2.75	1.92	1.86
		[110]	1.22	1.97	0.89	1.34	1.29
		[111]	1.42	0.78	1.26	1.10	1.09
Алмаз	0.40	[100]	0.93	1.18	2.11	1.53	1.55
		[110]	1.17	1.32	0.96	1.14	1.11
		[111]	1.27	0.86	1.40	1.17	1.13
YAG	0.03	[100]	1.09	1.12	1.16	1.13	—
		[110]	1.12	1.13	1.08	1.11	—
		[111]	1.13	1.04	1.25	1.15	—
NaCl	-0.48	[100]	1.91	0.81	0.94	1.03	1.05
		[110]	1.01	1.72	0.99	1.26	1.23
		[111]	0.86	1.19	1.77	1.42	1.43
CaF ₂	-0.33	[100]	1.59	0.78	0.95	0.97	0.98
		[110]	1.04	1.86	0.98	1.33	1.30
		[111]	0.92	1.13	1.86	1.46	1.45
YIG	-0.04	[100]	1.14	1.00	1.10	1.06	—
		[110]	1.10	1.18	1.09	1.13	—
		[111]	1.09	1.05	1.49	1.25	—

При переходе к нанопроводам из кристаллов второго типа направления фокусировки и дефокусировки фононов и, соответственно, минимальные и максимальные значения длин пробега меняются местами. Например, для NaCl минимальные значения $\tilde{\Lambda}_{C[111]}^l = 0.86$, $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^{t_1} = 0.81$, $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^{t_2} = 0.94$ имеют место в тех направлениях, где для Ge имели место максимальные, а максимальные значения $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^l = 1.91$, $\tilde{\Lambda}_{C[110]}^{t_1} = 1.72$, $\tilde{\Lambda}_{C[111]}^{t_2} = 1.77$ реализуются в направлениях, где для Ge имели ме-

сто минимумы длин пробега. Следует учесть, что в кристаллах первого и второго типа поперечные моды t_1 и t_2 также меняются местами [18]. Отметим, что для нанопроводов с существенной анизотропией упругой энергии (LiF, GaAs, Ge, Si) значения минимальных и максимальных длин Казимира существенно отличаются от величины $\tilde{\Lambda}_{C iso}$. Однако для кристаллов YAG и YIG со слабой анизотропией упругой энергии ($|k - 1| \ll 1$) они близки к значениям $\tilde{\Lambda}_{C iso}$ (см. табл. 2). При этом для каждой мо-

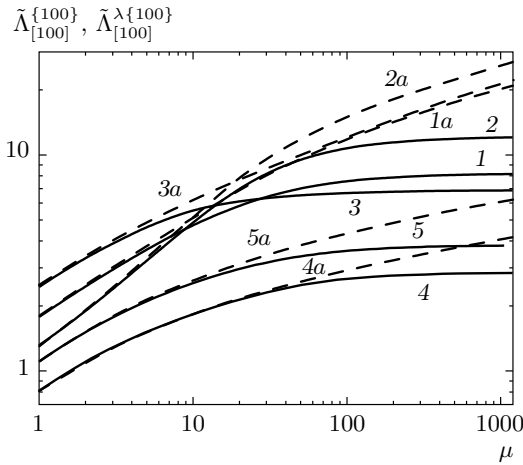


Рис. 1. Зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ (кривые 1 и 1a), а также длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\lambda\{100\}}(\mu)$ в пленках германия от приведенной ширины. Сплошные кривые 1–5 соответствуют длинам пробега фононов в наноструктурах с параметрами $L = 100D$, $D = 50$ нм, штриховые кривые 1a–5a — длинам Казимира. Кривые 2, 2a — $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\lambda\{100\}}(\mu)$; 3, 3a — $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\lambda_2\{100\}}(\mu)$; 4, 4a — $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\lambda\{100\}}(\mu)$. Кривые 5, 5a относятся к модели изотропной среды, кривая 5a — результат Мариса и Тамуры [6] для длины Казимира

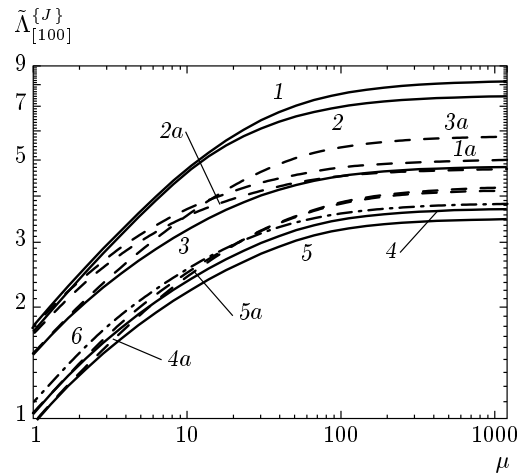


Рис. 2. Зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{J\}}(\mu)$ от приведенной ширины в наноструктурах с параметрами $L = 100D$, $D = 50$ нм для направления градиента температур [100]. Сплошные кривые 1–5 соответствуют ориентации $\{J\} = \{100\}$, штриховые кривые 1a–5a — ориентации $\{J\} = \{110\}$. Кривые 1, 1a — Ge; 2, 2a — GaAs; 3, 3a — алмаз; 4, 4a — NaCl; 5, 5a — CaF₂. Кривая 6 относится к модели изотропной среды

ды в зависимости от направления они могут быть как больше, так и меньше значения $\tilde{\Lambda}_{C iso}$. Как видно из табл. 2, наши результаты для длин Казимира согласуются с полученными в [5] в пределах погрешности 1–4%. Для изотропных сред длины свободного пробега в режиме граничного рассеяния определяются полностью геометрическими параметрами наноструктур. Поэтому они могут быть использованы в качестве удобной системы сравнения для длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(k_0, \mu)$ в упруго-анизотропных кристаллах при изменении направления теплового потока или при сравнении длин пробега в наноструктурах, выполненных из различных материалов (см. рис. 1, 2).

Длины Казимира для монокристаллических пленок определяются не только геометрическими параметрами, но и в значительной степени зависят от ориентации теплового потока и плоскости пленки, т. е. $\tilde{\Lambda}_C(\mu) \Rightarrow \tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$. В предельном случае $\mu \gg 1$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ могут быть представлены в виде (11). При этом значения коэффициентов A и B становятся зависящими от параметров $[I(\psi)]$ и $\{J\}$. Как видно из рис. 1, учет конечной длины приво-

дит к устранению расходимости длин пробега как в изотропных, так и в монокристаллических пленках. При фиксированной длине $L = 100D$ и толщине пленки $D = 50$ нм интервал интенсивного роста длин свободного пробега фононов с увеличением ширины пленки $W = \mu D$ ограничен ее длиной. При значениях $W > 10L$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ выйдут на насыщение (см. рис. 1, 2).

Проанализируем зависимости теплопроводности пленок для кристаллов первого и второго типа от ориентации $\{J\}$ боковых граней наноструктур. Для этого фиксируем направление градиента температуры, $[I] = [100]$, и рассмотрим зависимости теплопроводности от приведенной ширины пленки $\mu = W/D$ при $L/D = 100$ ($k_0 = 50$) для двух ориентаций плоскости пленки, $\{J\} = \{100\}$ и $\{J\} = \{110\}$. Как видно из рис. 2, различие сплошных и штриховых линий для средних длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ и $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ при $\mu = 1$ составляет менее 3%. Поэтому для нанопроводов с квадратным сечением ($\mu = 1$) зависимости теплопроводности от ориентации боковых граней для всех рассмотренных кристаллов малы, и ими можно пренебречь. Однако в достаточно широких монокристаллических пленках значения длин пробега фононов в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки.

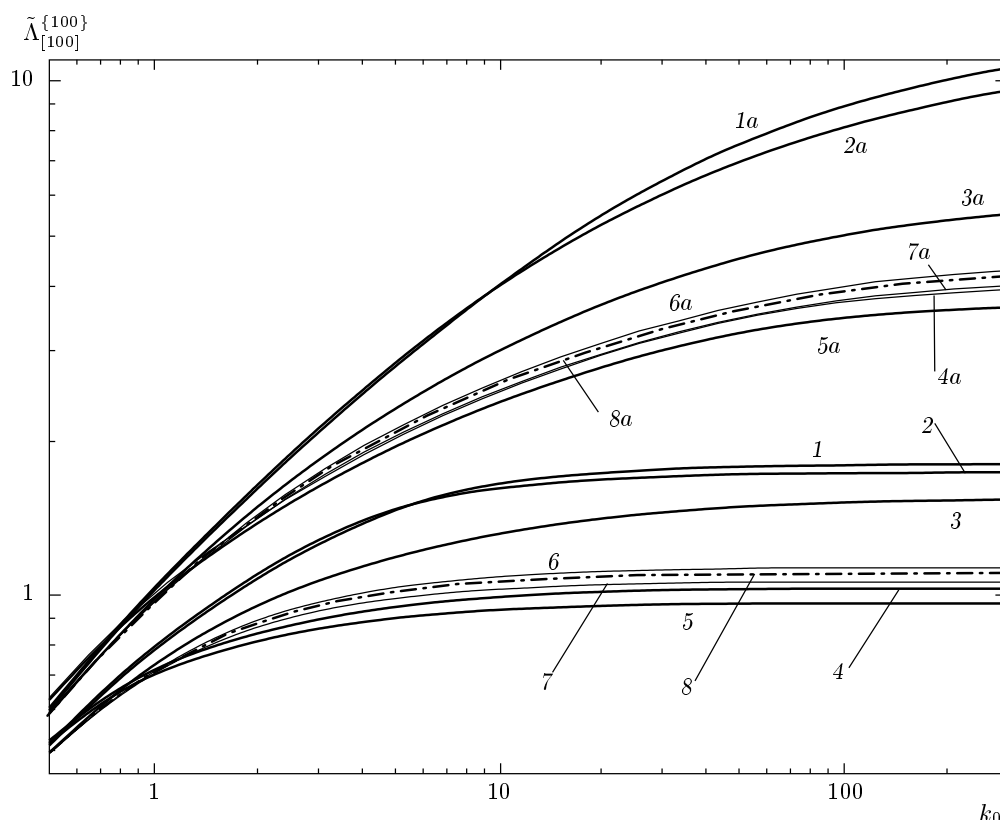
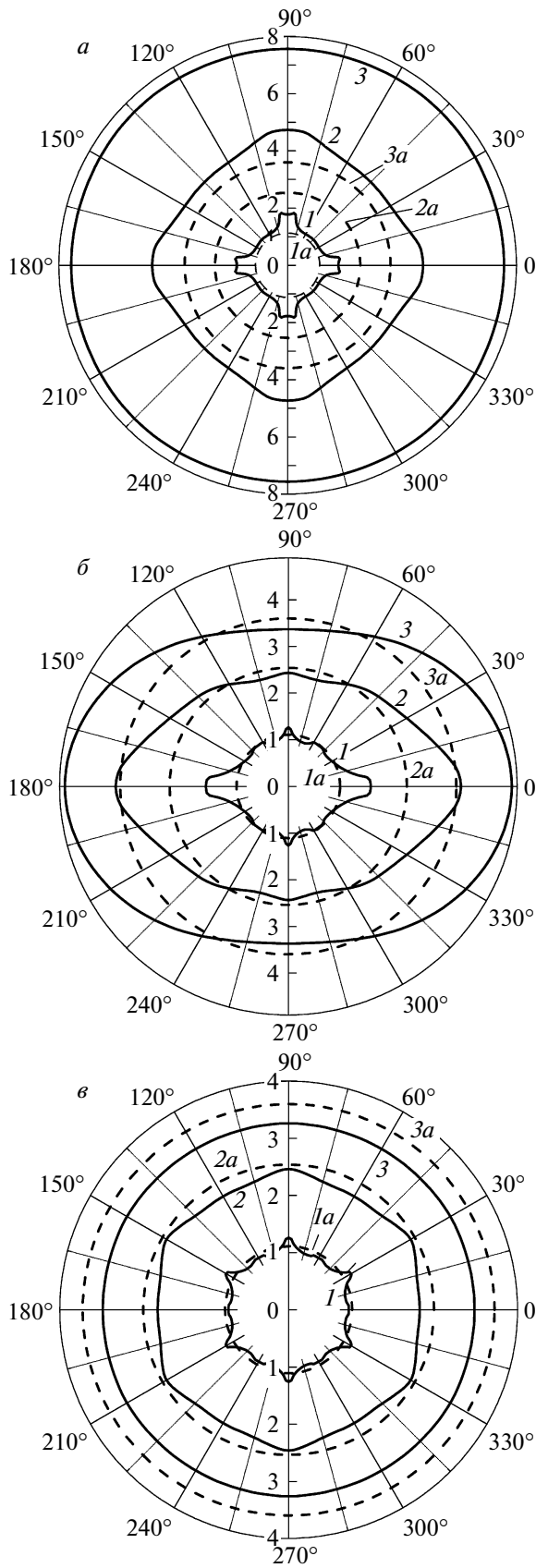


Рис. 3. Зависимости приведенных длин свободного пробега фононов от параметра k_0 для градиента температуры в направлении $[100]$ и ориентации плоскости пленки $\{100\}$ в кристаллах Ge, GaAs, алмаз, NaCl, CaF₂, YAG, YIG — соответственно сплошные кривые 1 и 1a, 2 и 2a, 3 и 3a, 4 и 4a, 5 и 5a, 6 и 6a, 7 и 7a. Кривые 1–8 рассчитаны для $\mu = 1$, кривые 1a–8a — для $\mu = 100$. Штрихпунктирные кривые 8, 8a относятся к модели изотропной среды

Следует отметить, что для ориентации плоскости пленки $\{J\} = \{100\}$ и направления градиента температуры $[I] = [100]$ длины пробега в кристаллах первого типа больше, чем в изотропных средах, а в кристаллах второго типа — меньше (см. рис. 2). Причем в монокристаллических пленках из кристаллов первого типа с существенной анизотропией упругой энергии (LiF, GaAs, Ge, Si) значения $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ для ориентации $\{J\} = \{100\}$ растут значительно быстрее с увеличением ширины пленки μ , чем $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ для $\{J\} = \{110\}$ (см. рис. 2). При переходе от нанопроводов ($\mu = 1$) к широким пленкам с $\mu = 100$ и $\{J\} = \{100\}$ полная теплопроводность и длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ для кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG возрастают соответственно в 4.39, 4.06, 4.25, 4.40, 3.03, 3.08 раз. Для ориентации $\{J\} = \{110\}$ в этом случае рост менее значителен: длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ для кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG возрастают соответственно в 2.73, 2.68, 2.72, 2.72, 3.63, 3.24 раз. Отноше-

ния теплопроводностей $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(\mu)/\kappa_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ для пленок Ge с ориентациями $\{J\} = \{100\}$ и $\{J\} = \{110\}$ при $\mu = 10$ и $\mu = 100$ равны соответственно 1.3 и 1.6. Для алмазных пленок ситуация качественно другая. Для них, в отличие от пленок из кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{100\}}(\mu)$ при $\{J\} = \{100\}$ с увеличением μ возрастают медленнее, чем для $\{J\} = \{110\}$ (см. рис. 2). Поэтому при $\mu = 100$ отношение $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(100)/\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(100) = 0.83$, т. е. становится меньше единицы.

Для наноструктур из кристаллов второго типа, CaF₂ и NaCl, зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ и $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ мало отличаются от зависимостей $\tilde{\Lambda}_{iso}(\mu)$. При $\mu = 1$ их значения для обеих ориентаций $\{J\}$ меньше, чем для изотропной среды в 1.15 и 1.07 раза соответственно для CaF₂ и NaCl. При увеличении ширины пленки длины пробега возрастают, причем для $\{J\} = \{100\}$ они остаются меньше, чем $\tilde{\Lambda}_{iso}(100)$ на 11 % и 4 % соответственно для CaF₂ и NaCl. Однако для ориентации плоскости пленки $\{110\}$ они



возрастают быстрее, и при $\mu = 100$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(100)$ для CaF_2 и NaCl становятся больше, чем $\tilde{\Lambda}_{iso}(100)$, на 7%.

Рассмотрим зависимости длин свободного пробега фононов, нормированных на толщину пленки, от приведенной длины пленки $k_0 = L/2D$. Сравним эти зависимости для нанопроводов ($\mu = 1$) и достаточно широких пленок ($\mu = 100$). С увеличением длины наноструктур величины теплопроводности и длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[J]}^{\{J\}}(k_0, \mu)$ возрастают тем быстрее, чем больше ширина пленки и чем больше анизотропия упругой энергии кристалла (см. рис. 3 и табл. 1). Так, например, при увеличении параметра L/D от 1 до 100 величины теплопроводности и длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, \mu)$ в нанопроводах ($\mu = 1$) из кристаллов первого типа LiF , GaAs , Ge , Si , алмаз, YAG возрастают соответственно в 3.59, 3.31, 3.49, 3.69, 3.02 и 2.29 раз. Для кристаллов второго типа CaF_2 , NaCl , YIG рост значительно меньше: длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, 1)$ возрастают соответственно в 1.85, 1.98 и 2.16 раз. Для широких пленок ($\mu = 100$) рост оказывается значительно больше: значения $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, 100)$ при увеличении параметра L/D от 1 до 100 для кристаллов первого типа LiF , GaAs , Ge , Si , алмаз, YAG возрастают соответственно в 13.61, 11.62, 12.58, 13.98, 7.68 и 6.22 раз. Для кристаллов второго типа CaF_2 , NaCl , YIG значения длин пробега в этом случае возрастают соответственно в 5.16, 5.48 и 5.92 раз. Отметим, что для кристаллов YAG и YIG со слабой анизотропией упругой энергии ($|k - 1| \ll 1$) зависимости $\tilde{\Lambda}_{[J]}^{\{J\}}(k_0, \mu)$ и $\tilde{\Lambda}_{iso}(k_0, \mu)$ от k_0 мало отличаются друг от друга (см. рис. 3). Причем для кристаллов YAG с положительной анизотропией упругих модулей ($k - 1 = 0.03$) кривые б и бa лежат на 1.5–2% выше кривых 8 и 8a, соответствующих модели изотропной среды. Однако для кристаллов YIG с отрицательной анизотропией ($k - 1 = -0.04$) кривые 7 и 7a расположены заметно ниже кривых 8 и 8a соответственно на 4 и

Рис. 4. Угловые зависимости длин свободного пробега фононов, нормированных на толщину пленки D для наноструктур длиной $L = 100D$, полученных из кристаллов Ge , для случаев, когда градиент температур вращается в плоскости пленки $\{100\}$ (а), $\{110\}$ (б) и $\{111\}$ (в). Кривые 1, 1a, 2, 2a и 3, 3a рассчитаны соответственно для $\mu = 1, 10$ и 100; кривые 1–3 — в модели анизотропного континуума, штриховые кривые 1a–3a — в модели изотропной среды

4.5 %. При этом кривая $7a$ почти совпадает с кривой $4a$ для кристаллов YAG.

При длинах пленок, превышающих их ширину на два порядка величины, зависимости длин пробега фононов выходят на насыщение. Обращает на себя внимание качественное различие зависимостей $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, \mu)$ для пленок и нанопроводов при $k_0 > 1$. Для пленок с плоскостью $\{100\}$ и направлением теплового потока $[100]$ значения длин свободного пробега в кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) оказываются выше, чем в изотропных средах, как в нанопленках, так и в нанопроводах (см. рис. 3). Для кристаллов второго типа (CaF₂, NaCl, YIG) в этом случае они оказываются ниже, чем в изотропных средах.

4. АНИЗОТРОПИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ДЛИН СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В НАНОСТРУКТУРАХ

В этом разделе проанализируем угловые зависимости теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T)$ и средних длин пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ при вращении градиента температуры в плоскости пленок для различных ориентаций. Поскольку $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = (1/3)C_V(T)\bar{S}\Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}$, при фиксированной температуре угловые зависимости теплопроводности различаются только постоянным множителем $(1/3)C_V(T)\bar{S}$. Определим ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальную или минимальную теплопроводность.

Сначала рассмотрим изменение анизотропии средних длин свободного пробега фононов при переходе от нанопроводов с квадратным сечением к достаточно широким пленкам. Затем проанализируем изменение анизотропии длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ для различных ориентаций плоскостей пленок относительно осей кристаллов и сравним с результатами, следующими из модели изотропной среды. Длины пробега $\tilde{\Lambda}_{iso}(k_0, \mu)$ изотропны и определяются полностью геометрическими параметрами. Здесь они используются в качестве системы сравнения для длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ в различных упруго-анизотропных наноструктурах. Как видно из рис. 4–6, угловые зависимости длин свободного пробега фононов в монокристаллических наноструктурах при вращении теплового потока в плоскостях $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ значительно отличаются как друг от друга, так и от рассчитанных в модели изотропной среды. Для кристаллов одного типа

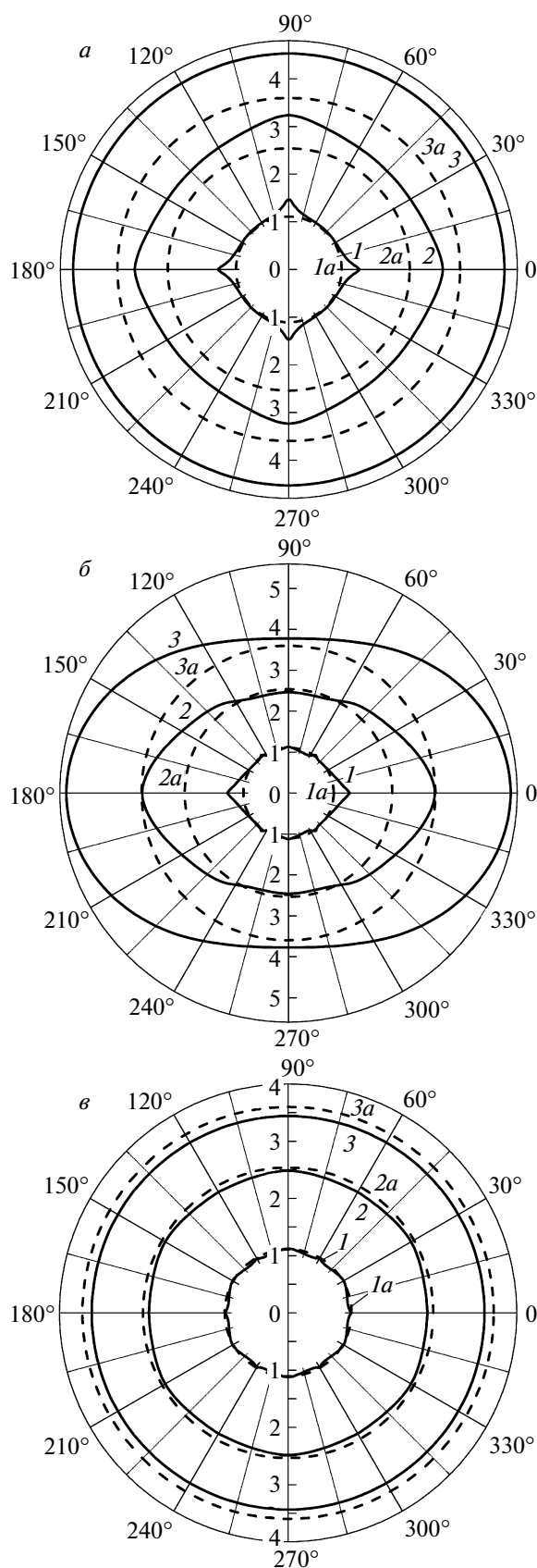


Рис. 5. То же, что на рис. 4 для алмазных наноструктур

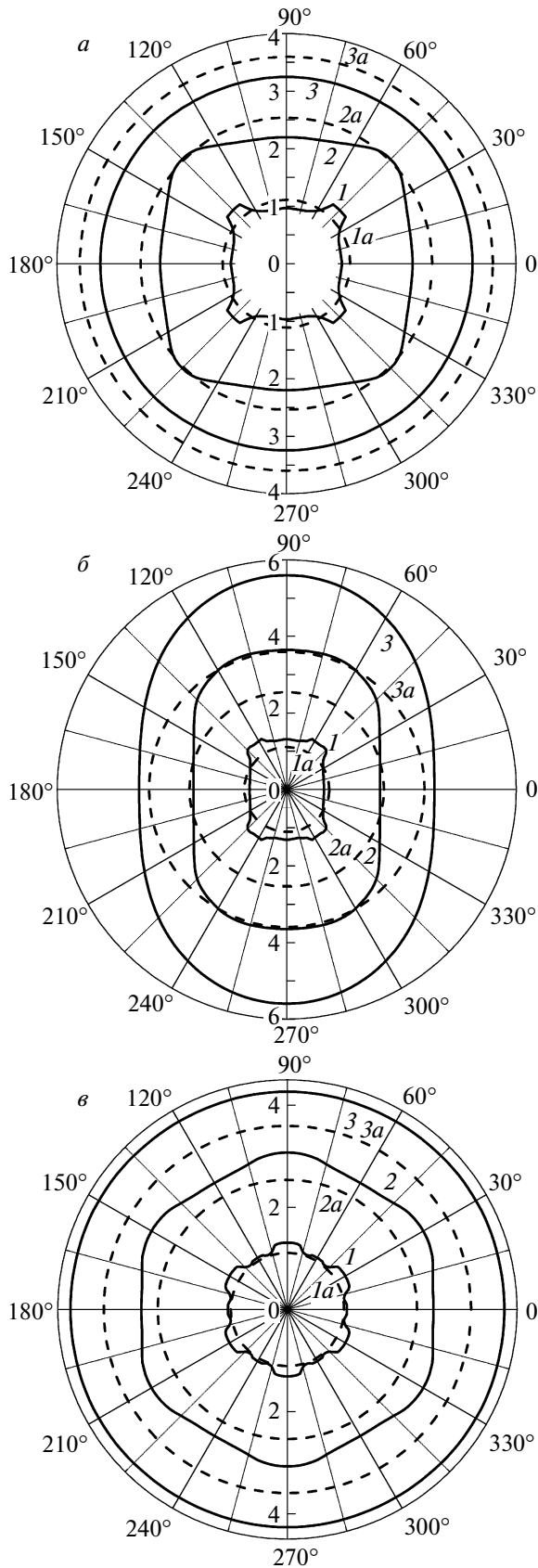


Рис. 6. То же, что на рис. 4 для наноструктур, полученных из кристаллов CaF_2

угловые зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ для всех направлений теплового потока и рассмотренных ориентаций плоскостей пленок качественно подобны, отличаясь только большей или меньшей степенью анизотропии. Поэтому на рис. 4–6 мы привели угловые зависимости $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ только для двух кристаллов первого типа, Ge и алмаза, и одного кристалла второго типа, CaF_2 .

Рассмотрим анизотропию фонового транспорта в нанопроводах. Для кристаллов первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа [001] и обеспечивается медленной поперечной модой, которая фокусируется в этом направлении (см. рис. 4, 5). В направлениях [110] и [111] угловые зависимости теплопроводности и $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(1)$ имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой соответственно быстрой поперечной и продольной модами (см. рис. 4, 5). При вращении теплового потока в плоскости {100} длины пробега фононов в нанопроводах, $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(1)$, для кристаллов первого типа оказываются выше, чем для изотропной среды, $\tilde{\Lambda}_{iso}(1)$. Для плоскости {110} длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(1)$ для кристаллов первого типа имеют большие значения, чем величина $\tilde{\Lambda}_{iso}(1)$ только для направлений теплового потока, близких к [100] и [110]. Для плоскости {111} длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(1)$ в широком интервале углов ψ оказываются меньше, чем в изотропной среде (см. рис. 4в, 5в). Однако для направлений, близких к [110], они превышают значения для изотропных сред.

В противоположность этому для кристаллов второго типа (CaF_2 , NaCl, YIG) максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа [110] и обеспечивается быстрой поперечной модой, которая фокусируется в этом направлении (см. рис. 6). Для направлений [111] и [100] угловые зависимости теплопроводности и длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(1)$ имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой соответственно медленной поперечной и продольной модами. Для плоскости пленки {100} длины пробега фононов, $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(1)$, в нанопроводах из кристаллов второго типа оказываются ниже, чем в изотропных средах, $\tilde{\Lambda}_{iso}(1)$, за исключением направлений теплового потока, близких к [110] (см. рис. 6). Для плоскости {111} длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(1)$ в широком интервале углов ψ оказываются больше, чем в изотропных средах, за исключением направлений, близких к [110].

Как видно из рис. 4–6, рост ширины пленок приводит к увеличению длин свободного пробега и к

качественному изменению их угловых зависимостей $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ по сравнению с нанопроводами. Для пленок с плоскостями $\{100\}$ и $\{111\}$ при $\mu = 100$ они становятся почти изотропными для кристаллов обоих типов, хотя при $\mu = 10$ небольшая анизотропия еще остается (см. рис. 4а, 4в, 5а, 5в). Причем в кристаллах первого типа для пленок с ориентацией $\{100\}$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ больше, чем в изотропных средах, однако для ориентации $\{111\}$ ситуация обратная — для всех направлений длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ меньше, чем в изотропной среде. В пленках из кристаллов второго типа угловые зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ качественно другие. Для них выполняются обратные неравенства: для ориентации $\{100\}$ при $\mu = 100$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ для всех углов ψ меньше, а величины $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ — больше, чем в изотропных средах. Для плоскости $\{110\}$ угловые зависимости $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в достаточно широких пленках принимают эллипсоидальный вид, причем в кристаллах первого типа с длинной осью вдоль направления $[100]$, а в кристаллах второго типа — вдоль направления $[110]$ (см. рис. 4б–6б).

Отношения длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)/\tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{110\}}(\mu)$ для пленок с плоскостью $\{110\}$ при $\mu = 100$ для кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, алмаза и YAG составляют соответственно 1.45, 1.39, 1.42, 1.50, 1.44 и 1.03. В кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si, YAG) длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в плоскости $\{110\}$ оказываются меньше, чем в плоскости $\{100\}$ при всех углах ψ . Однако для алмазных пленок в направлениях, близких к $[100]$, длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100)$ оказываются больше, чем $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100)$, тогда как для направлений, близких к $[110]$, ситуация обратная. Причем длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100)$ для алмазных пленок с ориентацией $\{J\} = \{110\}$ оказываются больше, чем в изотропных средах при всех углах ψ (см. рис. 5б).

В противоположность этому, для кристаллов первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si) в области углов $-\pi/3 < \psi < \pi/3$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100) > \tilde{\Lambda}_{iso}^{\{110\}}(100)$, тогда как вне этого интервала $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100) < \tilde{\Lambda}_{iso}^{\{110\}}(100)$.

Следует отметить, что максимальные значения теплопроводности при $\mu = 100$ в кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si, YAG) достигаются для ориентации пленки $\{100\}$, а минимальные — для ориентации пленки $\{111\}$ (см. рис. 4а, в). В противоположность этому, для ориентации пленки $\{100\}$ длины пробега в кристаллах второго типа (CaF₂, NaCl, YIG) имеют минимальные значения. Максимальные

значения теплопроводности для них при $\mu = 100$ достигаются для ориентации пленки $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$. При этом отношения длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(100)/\tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{110\}}(100)$ в кристаллах CaF₂, NaCl, YIG составляют соответственно 0.69, 0.77 и 0.94.

Итак, нами показано, во-первых, что в наноструктурах из кристаллов с положительной ($k-1 > 0$) и отрицательной ($k-1 < 0$) анизотропией упругих модулей второго порядка не только спектр и векторы поляризации [18], но и анизотропия длин свободного пробега фононов качественно различаются. Во-вторых, угловые зависимости теплопроводности и длин свободного пробега фононов для кристаллов обоих типов качественно изменяются при переходе от нанопроводов к достаточно широким пленкам. В-третьих, для получения максимальных значений теплопроводности в кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si, YAG) необходимо использовать пленки с плоскостью $\{100\}$, а для получения минимальных значений — пленки с плоскостью $\{111\}$. Для алмазных пленок максимальные значения теплопроводности при $\mu = 100$ достигаются для плоскости $\{110\}$ в направлении $[100]$, а минимальные значения — для пленок с плоскостью $\{111\}$. Максимальные значения теплопроводности в пленках из кристаллов второго типа (CaF₂, NaCl, YIG) при $\mu = 100$ достигаются для ориентации плоскости $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$, а минимальные — для ориентации плоскости пленки $\{100\}$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены особенности фононного транспорта в монокристаллических нанопленках и нанопроводах, полученных из кристаллов первого (LiF, GaAs, Ge, Si алмаз и YAG) и второго (CaF₂, NaCl, YIG) типа при низких температурах в рамках метода Казимира–МакКарди [5, 8]. Проанализированы зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров, а также от направлений теплового потока и ориентации боковых граней наноструктур для двух типов кристаллов. Основные результаты работы можно сформулировать следующим образом.

1. Для изотропных сред длины пробега фононов разных поляризаций совпадают и равны средней длине свободного пробега. Они определяются полностью геометрическими параметрами и являются удобной системой сравнения для упруго-анизотропных наноструктур.

2. В упруго-анизотропных наноструктурах длины пробега фононов разных поляризаций различны и существенно зависят не только от их геометрических параметров, но и от направлений теплового потока и ориентации боковых граней наноструктур. Для нанопроводов с квадратным сечением величины теплопроводности и длин пробега фононов определяются главным образом направлением теплового потока, а их зависимость от ориентации боковых граней мала. Однако в достаточно широких пленках величины теплопроводности в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки.

3. Анизотропия теплопроводности и длин свободного пробега фононов для наноструктур из кристаллов первого и второго типа качественно различаются как в нанопленках, так и в нанопроводах. Для кристаллов одного типа угловые зависимости длин пробега для всех направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок качественно подобны, отличаясь только большей или меньшей степенью анизотропии.

4. Определены ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальные или минимальные значения теплопроводности в плоскости пленок. В кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si и YAG) для получения максимальных значений теплопроводности в плоскости пленок необходимо использовать пленки с плоскостью $\{100\}$, а для получения минимальных значений — пленки с плоскостью $\{111\}$. Для алмазных пленок максимальные значения теплопроводности при $\mu = 100$ достигаются для плоскости $\{110\}$ в направлении $[100]$, а минимальные значения — для пленок с плоскостью $\{111\}$. Максимальные значения теплопроводности в пленках на основе кристаллов второго типа (CaF₂, NaCl, YIG) при $\mu = 100$ достигаются для ориентации плоскости $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$, а минимальные — для ориентации плоскости пленки $\{100\}$.

5. Учет конечной длины пленки приводит к устранению логарифмической расходимости длин Казимира при стремлении ширины пленки к бесконечности, как в изотропных средах, так и в упруго-анизотропных материалах. Интервал интенсивного роста длин пробега фононов с увеличением ширины пленки ограничен ее длиной. При значениях ширины пленки, в 10 раз превосходящих ее длину, зависимости длин пробега фононов выходят на насыщение.

Итак, нами убедительно показано, что при изложении экспериментальных результатов по теплопро-

водности нанопленок необходимо указывать направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно осей кристалла. Отсутствие такой информации в обзорах [1–3] делает невозможным использование их для сравнения с результатами теоретических исследований.

Авторы выражают благодарность А. П. Танкееву и А. В. Инюшкину за обсуждение результатов работы и критические замечания. Работа выполнена по плану РАН в рамках темы №01.2.006.13395 при поддержке программы ОФН РАН (грант №12-Т-2-1018), а также гранта Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (НШ-1540.2014.2) и фонда «Династия».

ЛИТЕРАТУРА

1. D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson et al., *J. Appl. Phys.* **93**, 793 (2003).
2. A. D. McConnell and K. E. Goodson, *Ann. Rev. Heat Transfer* **14**, 128 (2005).
3. D. G. Cahill, P. V. Braun, G. Chen et al., *J. Appl. Phys. Rev.* **1**, 011305 (2014).
4. D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi et al., *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2934 (2003).
5. A. K. McCurdy, H. J. Maris, and C. Elbaum, *Phys. Rev. B* **2**, 4077 (1970).
6. H. J. Maris and 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. R. Berman, F. E. Simon, and J. M. Ziman, *Proc. Roy Soc. London A* **220**, 171 (1953); R. Berman, E. L. Foster, and J. M. Ziman, *Proc. Roy Soc. London A* **231**, 130 (1955).
10. Дж. Займан, *Электронны и фононы*, Изд-во иностр. лит., Москва (1962).
11. Б. М. Могилевский, А. Ф. Чудновский, *Теплопроводность полупроводников*, Наука, Москва (1972).
12. B. Taylor, H. J. Maris, and C. Elbaum, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 416 (1969).
13. H. J. Maris, *J. Acoust. Soc. Amer.* **50**, 812 (1971).

14. J. P. Wolfe, *Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids*, Cambridge Univ. Press, New York (1998).
15. Y. F. Zhu, J. S. Lian, and Q. Jiang, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 113101 (2008).
16. N. Mingo, *Phys. Rev. B* **68**, 113308 (2003).
17. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley and Sons, New York (1956).
18. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, *ФТТ* **49**, 422 (2007).
19. J. R. Drabble and A. J. Brammer, *Sol. St. Comm.* **4**, 467 (1966).
20. B. Truel, C. Elbaum, and B. B. Chick, *Ultrasonic Methods in Solid State Physics*, Acad. Press, New York-London (1969).
21. C. V. Briscoe and C. F. Squire, *Phys. Rev.* **106**, 1175 (1957).
22. H. J. McSkimin and Andreatch, *J. Appl. Phys.* **35**, 2161 (1964).
23. H. J. McSkimin and W. L. Bond, *Phys. Rev.* **105**, 116 (1957).
24. Y. K. Yogurtcu, A. J. Miller, and G. A. Saunders, *J. Phys. C* **13**, 6585 (1980).
25. W. C. Overton and R. J. Swim, *Phys. Rev.* **84**, 758 (1951).
26. D. R. Huffman and M. H. Norwood, *Phys. Rev.* **117**, 709 (1960).
27. N. Mingo, *Phys. Rev. B* **68**, 113308 (2003); N. Mingo, L. Yang, D. Li, and A. Majumdar, *NanoLett.* **3**, 1713 (2003).
28. Z. Wang and N. Mingo, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 101903 (2011).
29. M. Asheghi, M. N. Touzelbaev, K. E. Goodson et al., *J. Heat Transfer* **120**, 30 (1998).
30. И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин, *ФТТ* **55**, 24 (2013).
31. I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, and A. V. Inyushkin, *Physica B* **416**, 81 (2013).
32. I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, and A. V. Inyushkin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **251**, 991 (2014), DOI: 10.1002/pssb.20135032 (2014).
33. M. Smoluchowski, *Ann. der Phys.* **33**, 1559 (1910).
34. M. Knudsen, *Ann. der Phys.* **28**, 75 (1909).
35. M. P. Zaitlin, L. M. Scherr, and A. C. Anderson, *Phys. Rev. B* **12**, 4487 (1975).