

ВЛИЯНИЕ ФОКУСИРОВКИ ФОНОНОВ НА ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ  
В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОПРОВОДАХ КАЛИЯ  
ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ© 2021 г. И. И. Кулеев<sup>a, \*</sup>, И. Г. Кулеев<sup>a</sup><sup>a</sup>Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

\*e-mail: kuleev@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 21.08.2020 г.

После доработки 30.09.2020 г.

Принята к публикации 02.10.2020 г.

Проанализирована роль сдвиговых волн и влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс электрон-фононного увлечения в монокристаллических нанопроводах калия при низких температурах. Для продольных компонент упругих мод использована теория деформационного потенциала. Для сдвиговых компонент колебательных мод использована константа электрон-фононного взаимодействия, определенная ранее из сопоставления результатов расчета термоэдс с экспериментальными данными для объемных кристаллов калия. Показано, что сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения нанопроводов. В режиме кнудсеновского течения фононного газа для нанопроводов со стороной сечения  $D = 5 \times 10^{-6}$  см вклад медленной поперечной моды  $t_2$  при учете только продольной компоненты в направлениях [111] оказался на 32% меньше, а при учете сдвиговой компоненты моды  $t_2$  он – на 12% больше, чем вклад продольных фононов. Определены направления, соответствующие максимальным и минимальным значениям термоэдс увлечения нанопроводов. Показано, что в условиях конкуренции граничного и объемных механизмов релаксации фононов с увеличением поперечного сечения нанопроводов анизотропия термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. Она превышает 30%, не только в режиме кнудсеновского течения фононного газа, но и при толщине образцов на два порядка большей. Это делает анизотропию термоэдс доступной для экспериментальных исследований.

**Ключевые слова:** термоэдс, фононы, нанопровода, электрон-фононное увлечение, кнудсеновское течение фононного газа

DOI: 10.31857/S0015323021020078

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В работах [1–4] было проанализировано влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения и решеточную теплопроводность объемных кристаллов калия и наноструктур на его основе, а также определен спектр и вектора поляризации фононов. В этих работах при анализе термоэдс и решеточной теплопроводности предполагали, что квазипоперечные фононы в кристаллах калия могут взаимодействовать с электронами только благодаря их продольной компоненте, а константа деформационного потенциала  $E_{0\lambda}$  одинакова для всех колебательных мод. Согласно [5–7],  $E_{0\lambda} \approx (n/N(\epsilon_F)) = (2/3)\epsilon_F \approx 1.41$  эВ,  $n$  – концентрация электронов,  $N(\epsilon_F)$  – плотность состояний на уровне Ферми. Было показано, что при низких температурах вклад медленных квазипоперечных мод в термоэдс увлечения в кристаллах калия, который ранее не учитывали (см. [8–12]), на порядок величины превышал вклад продольных фононов. Однако оказалось, что этого приближения

недостаточно для объяснения экспериментальных данных [11]. Расчет термоэдс увлечения объемных кристаллов калия в работе [4] интервале  $T = 1–3$  К дал значения, почти в два раза меньшие данных работы [11].

В работе [13] впервые учтено влияние сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию и термоэдс увлечения в металлах при низких температурах. Из сопоставления результатов расчета термоэдс и решеточной теплопроводности в объемных кристаллах калия с экспериментальными данными [11] в работе [13] определена константа электрон-фононного взаимодействия для сдвиговых компонент колебательных мод  $E_{0l} = 0.11$  эВ. Она оказалась на порядок величины меньше, чем следует из теории деформационного потенциала для продольных компонент [5–7]:  $E_{0L} \approx (n/N(\epsilon_F)) = (2/3)\epsilon_F \approx 1.41$  эВ,  $n$  – концентрация электронов,  $N(\epsilon_F)$  – плотность состояний на уровне Ферми. На необходимость учета влияния сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию в щелочных металлах указывал Займан в [5, 14]. Поскольку

**Таблица 1.** Средние значения продольных и поперечных компонент колебательных мод, а также их безразмерных скоростей релаксации на электронах, согласно формуле (6)

Переменная	L	T1	T2
$\langle\langle \mathbf{e}^\lambda \mathbf{n} \rangle\rangle^2$	0.9649	0.0028	0.0323
$\langle\langle [\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}]^2 \rangle\rangle$	0.0351	0.9972	0.9677
$\langle\langle [\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}] (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}) \rangle\rangle$	$2.8591 \times 10^{-6}$	$6.91 \times 10^{-9}$	$1.18 \times 10^{-8}$
$\langle v_{pe-L}^{*\lambda}(\theta, \varphi) \rangle$	$9.969 \times 10^4$	287	$3.33 \times 10^3$
$\langle v_{pe-T}^{*\lambda}(\theta, \varphi) \rangle$		627	608
$\langle v_{pe}^{*\lambda}(\theta, \varphi) \rangle$	$9.969 \times 10^4$	914	$3.94 \times 10^3$

сфера Ферми в щелочных металлах подходит достаточно близко к границе зоны Бриллюэна, то должна деформироваться в соответствии с симметрией решетки. Благодаря анизотропии спектра фермиевские электроны получают возможность взаимодействовать со сдвигowymi деформациями, т.е. с поперечной компонентой колебательных мод (см. [5, 15]). Однако отклонение поверхности Ферми от сферической в кристаллах калия мало, оно составляет 7%. Поэтому полученное в [13] соотношение констант  $E_{0L}$  и  $E_{0r}$  не является удивительным. Оно существенно отличается от полупроводниковых кристаллов, где благодаря значительно большей анизотропии спектра носителей тока константа  $E_{0r}$  на два порядка больше, и, как правило, превышает значение  $E_{0L}$  для продольных фононов мод (см., напр., [15, 16]).

Основной целью настоящей работы является анализ влияния сдвигowych волн на анизотропию термоэдс увлечения в монокристаллических нанопроводах калия при низких температурах. Полученные в работе результаты открывают новые перспективы для экспериментальных исследований электрон-фононной релаксации в щелочных и благородных металлах, а также влияния фокусировки фононов на термоэдс увлечения в наноструктурах на их основе.

## 2. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В УПРУГО-АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Ранее при исследовании электрон-фононного увлечения в металлах для фононов использовали модель изотропной среды (см., напр., [8–12, 17–19]). В этой модели электроны могут взаимодействовать только с продольными фононами. В упруго-анизотропных кристаллах распространяются квазипродольные и квазипоперечные колебания, ко-

торые не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными: их вектора поляризации  $\mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q})$  не совпадают ни с направлением волнового вектора  $\mathbf{q}$ , ни с нормалью к нему [20–22]. Индекс поляризации  $L$  соответствует продольным фононам,  $t_1$  и  $t_2$  – соответственно “быстрой” и “медленной” поперечным модам. Значения модулей упругости второго порядка при  $T = 4.2$  К взяты из работы [21]. В упруго-анизотропных металлах квазипоперечные фононы могут взаимодействовать с электронами и вносить вклад в термоэдс увлечения за счет продольной компоненты, которая определяется скалярным произведением  $(\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n})$ ,  $\mathbf{n} = (\mathbf{q}/q)$  – единичный волновой вектор фонона. В работе [13] сформулирован феноменологический метод, который позволяет учесть влияние сдвигowych волн на электрон-фононную релаксацию и термоэдс увлечения в металлах. Он основан на том, что поле смещений в упругой среде  $\mathbf{u} = A \mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q}) \exp(i(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r}))$  можно представить в виде суммы двух слагаемых: первое из них характеризует потенциальное поле, обусловленное деформациями сжатия и растяжения, – поле смещений для продольных волн, а второе – вихревое поле, обусловленное сдвигowymi деформациями, для поперечных волн (см. подробнее [21], раздел 3):

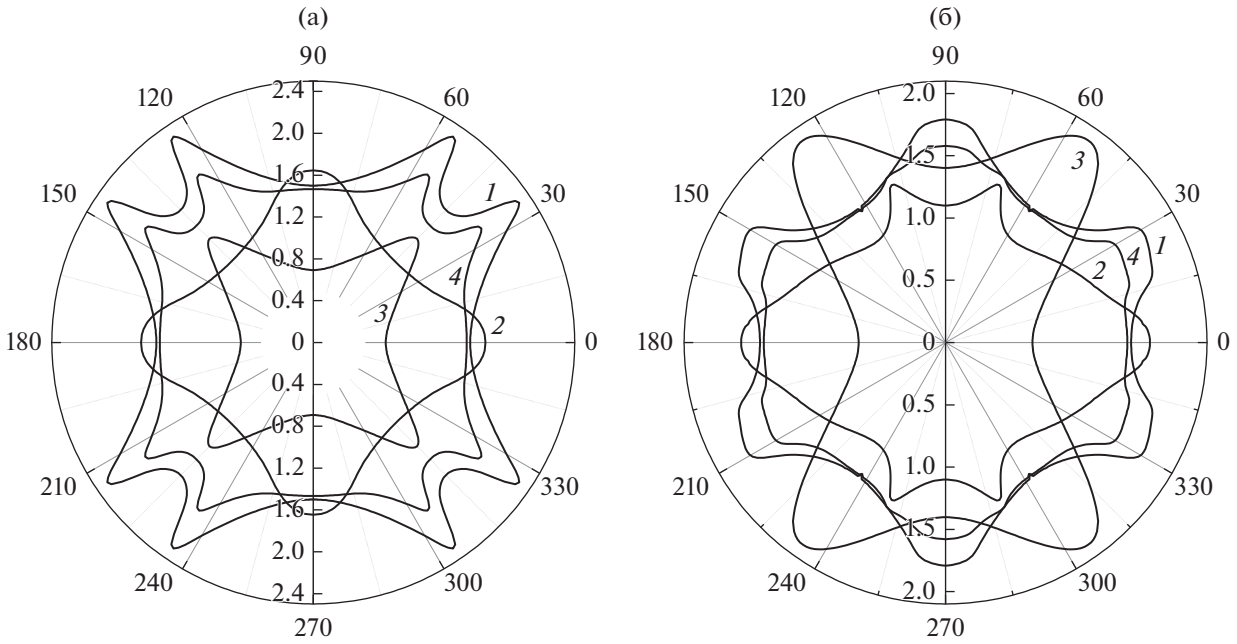
$$\mathbf{u} = \nabla \psi + [\nabla \times \chi] \Rightarrow \mathbf{n}(\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}) + [\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}]. \quad (1)$$

Поэтому согласно [13] фурье-образ матричного элемента электрон-фононного взаимодействия при выделении продольных и поперечных компонент векторов поляризации колебательных мод можно представить в виде:

$$\begin{aligned} |C_q^\lambda(\theta, \varphi)|^2 &= (C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 q, \quad (C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 \equiv \\ &\equiv (E_{\text{eff}}^\lambda)^2 \hbar / S^\lambda(\theta, \varphi) \rho, \quad (2) \\ (E_{\text{eff}}^\lambda)^2 &= (E_{0L}^2 (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n})^2 + E_{0r}^2 ([\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}]^2)). \end{aligned}$$

Фазовые скорости фононов  $S^\lambda(\theta, \varphi)$  определены в работах [1–3].

Отметим, что в отличие от модели изотропной среды, эффективная константа связи  $(E_{\text{eff}}^\lambda(\theta, \varphi))^2$  является функцией углов  $\theta$  и  $\varphi$ , которые определяются квадратами продольных и поперечных компонент векторов поляризации (см. табл. 1). Для продольных фононов отклонение от изотропного распределения малы, они не превышает 10% (см. [13], рис. 1). Однако для медленной поперечной моды величина  $(E_{\text{eff}}^{t_2}(\theta, \varphi))^2$  меняется достаточно резко за счет вклада продольной компоненты, тогда как вклад сдвиговой компоненты остается практически изотропным (см. [13], рис. 1, кривая 3).



**Рис. 1.** Угловые зависимости средних длин пробега  $\Lambda_{[I(\psi)]}^{[j]}$  (кривые 4), а также длин пробега продольных (кривые 3), быстрых (кривые 2) и медленных квазипоперечных фононов (кривые 1), рассчитанных в режиме граничного рассеяния, для образцов калия с квадратным сечением  $D = 5 \times 10^{-6}$  см и длиной  $L = 50 D$  в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости грани куба (а), в диагональной плоскости (б).

### 3. РОЛЬ СДВИГОВЫХ ВОЛН В ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ НАНОПРОВОДОВ ИЗ КРИСТАЛЛОВ КАЛИЯ

Детали расчета термоэдс увлечения приведены в работах [2–4], поэтому их здесь мы не воспроизводим, а ограничимся конечными выражениями:

$$\alpha_{\text{drag}} = \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} 3 \left\langle \int_0^{\infty} (Z_q^{\lambda})^3 \text{th}(Z_q^{\lambda}/2) dZ_q^{\lambda} \times \left( \frac{v_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda})}{v_{ph}^{\lambda}(q)} \right) \left( \frac{T_{\delta}^{\lambda}}{T} \right) \{ \tilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3} \} \right\rangle, \quad (3)$$

$$T_{\delta}^{\lambda} = 2m_F (S^{\lambda}(\theta, \varphi))^2 / k_B, \quad q_T^{\lambda} = \frac{k_B T}{\hbar S^{\lambda}(\theta, \varphi)},$$

$$\langle A(\theta, \varphi) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_q A(\theta, \varphi), \quad Z_q^{\lambda} = \frac{\hbar \omega_q^{\lambda}}{k_B T}.$$

Здесь  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $\tilde{V}_{g3}^{\lambda}$  и  $n_{q3}$  – проекции групповой скорости и единичного волнового вектора фонона на направление градиента температур.

$$v_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda}) = \frac{m(\epsilon_F)(C_0^{\lambda})^2}{2\pi\hbar^3 k_F^3} (q_T^{\lambda})^5 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1). \quad (4)$$

Здесь  $N_{q\lambda}^0$  – функция Планка, фурье-компонента  $(C_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^2$  определена выражением (2). В работах [8–11] исследования термоэдс и решеточной теплопроводности проводили на кристаллах калия с концентрацией электронов  $n_e = 1.4 \times 10^{22}$  см<sup>-3</sup>,  $k_F = 0.75 \times 10^8$  см<sup>-1</sup>, эффективной массой  $m_F = 1.1m_0$  ( $m_0$  – масса свободного электрона),  $\epsilon_F \approx 2.12$  эВ,  $\rho \approx 0.91 \times 10^8$  г см<sup>-3</sup>. Для актуальных механизмов рассеяния скорость релаксации фононов может быть представлена в виде [1–4]:

$$v_{ph}^{\lambda}(q, \theta, \varphi) = v_{phB}^{\lambda}(\theta, \varphi) + \frac{k_B T}{\hbar} Z_q^{\lambda} [v_{pde}^{*\lambda}(\theta, \varphi) + v_{phi}^{\lambda}(q, \theta, \varphi)], \quad v_{pde}^{*\lambda} = [v_{pd}^{*\lambda}(\theta, \varphi) + v_{pe}^{*\lambda}(\theta, \varphi)]. \quad (5)$$

Здесь  $v_{pB}^{\lambda}(\theta, \varphi)$  и  $v_{pi}^{\lambda}(q, \theta, \varphi)$  – скорости релаксации фононов на границах и изотопическом беспорядке (см. [1–4]). Согласно оценкам [1, 2, 11], вклад изотопического рассеяния в теплоспротивление кристаллов калия при  $T = 2$  К мал, составляет менее 1.5%. Параметры  $v_{pe}^{*\lambda}(\theta, \varphi)$  и  $v_{pd}^{*\lambda}(\theta, \varphi)$  являются безразмерными скоростями релаксации фононов на электронах и дислокациях [1, 4]. Согласно [1, 2],  $v_{pd}^{*\lambda}(\theta, \varphi) \cong 2.03 \times 10^{-4} \tilde{N}_d$ ,  $N_d = 10^{11}$  см<sup>-2</sup>  $\times \tilde{N}_d$  – концентрация дислокаций, параметр  $\tilde{N}_d$  для об-

разцов с различной степенью деформации определен в [13] (см. табл. 1). Скорость релаксации фононов с поляризацией  $\lambda$  на электронах можно представить в виде:

$$v_{pe}^{*\lambda}(\theta, \varphi) = m_F^2 (C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 / 2\pi\hbar^4. \quad (6)$$

Как видно из табл. 2, скорость релаксации продольных фононов на электронах в 25 раз больше, чем для моды  $t_2$ . Из (5) видно, при понижении температуры роль рассеяния на дислокациях и электронах уменьшается.

Рассмотрим влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения в нанопроводах с квадратным сечением  $D = 5 \times 10^{-6}$  см и длиной  $L = 50 D$  в режиме граничного рассеяния. В этом случае размерное квантование электронного спектра можно не учитывать, поскольку поперечные размеры нанопровода  $D$  гораздо больше длины волны электрона: энергия Ферми  $\epsilon_F \cong 2.12$  эВ, длина волны фермиевского электрона  $\sim (10^{-8} - 10^{-7})$  см, что гораздо меньше поперечного размера нанопровода. Анализ, проведенный в работе [23] (см. также [24]) показал, что для нанопроводов с диаметрами большими 50 нм в интервале температур от 20 до 50 К теплопроводность следовала зависимости  $\kappa(T) \sim T^3$ , как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при указанных ограничениях влиянием пространственного конфайнмента на спектр акустических мод можно пренебречь и использовать модель анизотропного континуума для анализа фононного транспорта в нанопроводах.

В этом случае термоэдс увлечения нанопроводов может быть представлена в виде:

$$\alpha_{\text{drag}} = J_4 \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left( \frac{m_F^2 (k_B T)^4}{n_e^3 \hbar^8} \right) \left( \frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \times \\ \times \left( \frac{C_0^\lambda(\theta, \varphi)^2 \tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3}}{v_{phB}^\lambda(q) (S^\lambda(\theta, \varphi))^3} \right), \quad J_4 = (1/4) \times \\ \times \int_0^\infty (Z_q^\lambda)^4 \text{th}(Z_q^\lambda/2) / (\text{sh}(Z_q^\lambda/2))^2 dZ_q^\lambda \cong 24.1. \quad (7)$$

В этом пределе термоэдс увлечения в нанопроводах будет анизотропной и следовать зависимости  $\alpha_{\text{drag}} \approx B_2 T^4$  ([2, 3]). Однако при доминирующей роли объемных механизмов релаксации фононов на электронах и дислокациях термоэдс увлечения в калии будет изотропной и следовать асимптотики  $\alpha_{\text{drag}}(T) \approx AT^3$  [4–13]. Скорости релаксации фононов на границах определяются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическим параметром  $k_0 = L/2D$  [2, 24]. При выполнении неравенств  $|V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$  и  $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0$ : или  $|V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$  и  $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0$ :

$$v_{B|I(\psi)}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \\ = \frac{|V_{g3}^\lambda|}{k_0 D} \left\{ 1 - \frac{k_0 (|V_{g2}^\lambda| + |V_{g1}^\lambda|)}{2 |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2 |V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{3 (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}^{-1}. \quad (8)$$

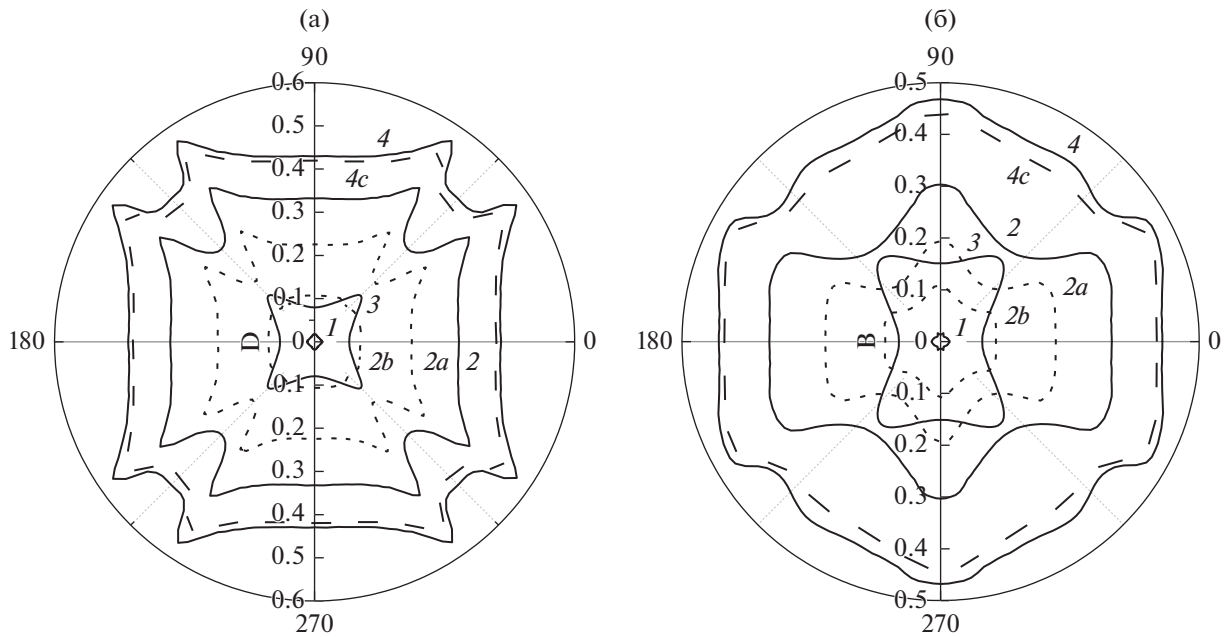
При выполнении противоположных неравенств они имеют вид:

$$v_{B|I(\psi)}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{6}{D} \frac{(V_{g1}^\lambda)^2}{(3|V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|)}, & \text{если } |V_{g2}^\lambda| < |V_{g1}^\lambda| \text{ и } |V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0; \\ \frac{6}{D} \frac{(V_{g2}^\lambda)^2}{(3|V_{g2}^\lambda| - |V_{g1}^\lambda|)}, & \text{если } |V_{g2}^\lambda| > |V_{g1}^\lambda| \text{ и } |V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0. \end{cases} \quad (9)$$

Как видно из формул (8) и (9), с уменьшением  $D$  скорости релаксации на границах возрастают. Поэтому для реализации кнудсеновского течения фононного газа в кристаллах калия необходимо уменьшить поперечные размеры нанопроводов до  $D < 10^{-5}$  см, чтобы диффузное рассеяние фононов на границах образца было более эффективно, чем в объемных механизмах релаксации.

Мы зафиксировали температуру 2 К и рассчитали угловые зависимости термоэдс увлечения и

вклады в нее от различных ветвей фононного спектра при вращении градиента температуры в плоскостях  $\{100\}$  и  $\{110\}$  (см. рис. 1). Из сравнения рис. 1 и 2 видно, что для всех мод угловые зависимости термоэдс увлечения качественно согласуются с зависимостями длин свободного пробега. Длины свободного пробега достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов: для медленной квазипоперечной моды — это направ-



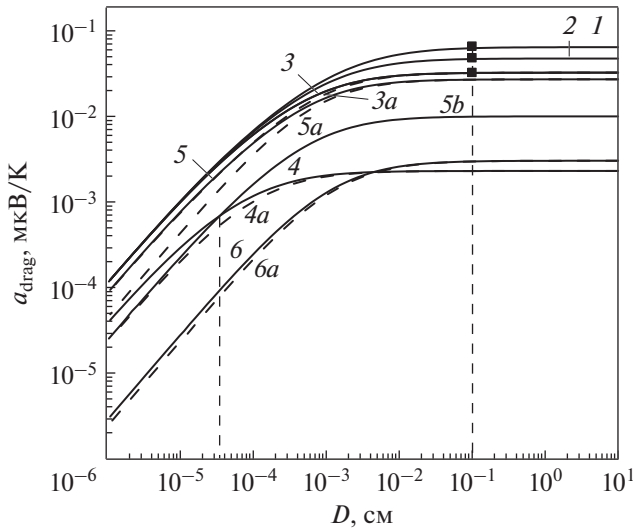
**Рис. 2.** Угловые зависимости термоэдс  $\alpha_{\text{drag}}$  (мкВ/К) (кривые 4), вкладов продольных  $\alpha_{\text{drag}}^L$  (кривые 3), квазиперечных фононов  $\alpha_{\text{drag}}^{t_2}$  (кривые 2) и  $\alpha_{\text{drag}}^{t_1}$  (кривые 1), а также вкладов от продольной (кривые 2a) и сдвиговой (кривые 2b) компоненты моды  $t_2$ , рассчитанные в режиме кнудсенского течения фононного газа, для нанопроводов калия с квадратным сечением  $D = 5 \times 10^{-6}$  см и длиной  $L = 50D$  в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости грани куба (а), в диагональной плоскости (б). Штриховая кривая 4с – полная термоэдс с учетом объемных механизмов релаксации для образца К5 с  $\epsilon \approx 0.053$ .

ления  $\theta_{\text{max}} = 0.58 \pm (\pi/2)n$ , соответствующих групповым скоростям в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях и направлениях дефокусировки – [111], соответственно (см. работы [1–3]). Для продольных фононов – наоборот: направления фокусировки – [111], а минимумы – в направлениях дефокусировки – [001]. Из рис. 2 следует, что величины термоэдс колебательных мод также достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов. Это неудивительно, так как, чем больше длина свободного пробега относительно рассеяния фононов на границах образца, тем больше вероятность электрона столкнуться с неравновесным фононом и получить дополнительный импульс от градиента температуры.

Как видно из рис. 2, преобладающий вклад в термоэдс увлечения нанопроводов вносят медленные квазиперечные фононы: их вклады в симметричных направлениях [001], [011] и [111] составляют 78, 65 и 57% соответственно (см. рис. 1). Это связано с аномально большим вкладом моды  $t_2$  в решеточную теплоемкость, которая в дебаевском приближении в 21 раз больше, чем для продольных фононов [4]:

$$C_V^{t_2} : C_V^{t_1} : C_V^L : C_V = 0.78 : 0.184 : 0.0366 : 1. \quad (10)$$

Анизотропия вкладов в термоэдс для моды  $t_2$  достаточно велика – отношения вкладов имеет вид:  $\alpha_{\theta_{\text{max}}}^{t_2\{100\}} : \alpha_{[100]}^{t_2\{100\}} : \alpha_{[110]}^{t_2\{110\}} : \alpha_{[111]}^{t_2\{110\}} = 2 : 1.5 : 1.4 : 1$ . Вклады продольных фононов в термоэдс увлечения также являются сильно анизотропными, они достигают максимумов в направлениях фокусировки – [111], а минимумов – в направлениях дефокусировки [001]:  $\alpha_{[111]}^{L\{110\}} : \alpha_{[110]}^{L\{100\}} : \alpha_{[100]}^{L\{100\}} = 2.5 : 1.9 : 1$ . Поскольку направления дефокусировки и минимумы вклада моды  $t_2$  соответствуют направлениям фокусировки и максимумам вклада продольных фононов, то в значительной степени они компенсируют друг друга. Поэтому анизотропия полной термоэдс значительно уменьшается:  $\alpha_{\theta_{\text{max}}}^{\{100\}} : \alpha_{[110]}^{\{110\}} : \alpha_{[100]}^{\{100\}} : \alpha_{[111]}^{\{110\}} = 1.32 : 1.1 : 1.01 : 1$ . Заметим, что при измерении термоэдс в симметричных направлениях ее анизотропия будет значительно меньше:  $\alpha_{[110]}^{\{110\}} : \alpha_{[100]}^{\{100\}} : \alpha_{[111]}^{\{110\}} = 1.1 : 1.01 : 1$ . Вклад сдвиговой компоненты моды  $t_2$  в термоэдс увлечения по порядку величины совпадает с вкладом продольных фононов (см. рис. 2, кривая 2b). Сдвиговые волны оказывают значительное влияние на соотношение вкладов моды  $t_2$  и продольных фононов, а также на анизотропию термоэдс увлечения. В направлениях фокусировки про-



**Рис. 3.** Зависимости максимальных значений полной термоэдс увлечения от толщины  $D$  нанопроводов калия с концентрацией дислокаций:  $\epsilon = 0$ ,  $\epsilon \approx 0.053$  (K5) и  $\epsilon \approx 0.1$  (K4) кривые 1, 2 и 3 соответственно. Кривая 3a дает зависимость минимальных значений полной термоэдс увлечения  $\alpha_{\text{drag}}^{[111]}$ , кривые (4, 4a), (5, 5a) и (6, 6a) – зависимости максимальных и минимальных значений вкладов продольных  $\alpha_{\text{drag}}^L$ , медленных и быстрых квазипоперечных фононов, соответственно; кривая 5b – вклад сдвиговых волн калия K4 с концентрацией дислокаций с  $\epsilon \approx 0.1$ .

дольных фононов [111] вклад моды  $t_2 \alpha_{[111]}^{t_2(110)}$  без учета сдвиговой компоненты оказался на 32% меньше, чем вклад  $\alpha_{[111]}^{L(110)}$ . Однако при учете сдвиговой компоненты моды  $t_2$  вклад  $\alpha_{[111]}^{t_2(110)}$  стал на 12% больше, чем вклад  $\alpha_{[111]}^{L(110)}$ . Для нанопроводов с  $D = 5 \times 10^{-6}$  см граничное рассеяние вносит доминирующий вклад в релаксацию фононов. Роль объемных механизмов мала: они обеспечивают уменьшение термоэдс увлечения от 1.5 до 5% для нанопроводов калия с  $\epsilon = 0$ , и от 2 до 7% для нанопроводов на основе K5 с  $\epsilon \approx 0.053$ .

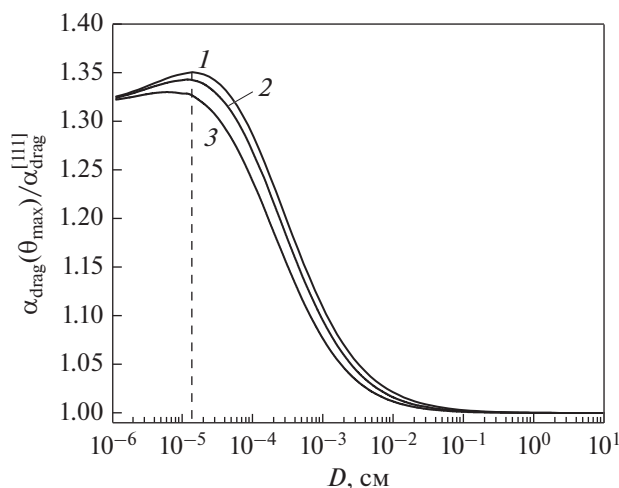
#### 4. АНИЗОТРОПИИ ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ В УСЛОВИЯХ КОНКУРЕНЦИИ ГРАНИЧНОГО И ОБЪЕМНЫХ МЕХАНИЗМОВ РЕЛАКСАЦИИ ФОНОНОВ

Рассмотрим изменение анизотропии термоэдс увлечения в условиях конкуренции граничного и объемных механизмов релаксации фононов. С увеличением поперечного сечения нанопроводов скорость релаксации фононов на границах ослабляется, а роль объемных механизмов возрастает. В результате этого анизотропия вкладов продоль-

ной и квазипоперечных мод в термоэдс увлечения монотонно уменьшается (см. рис. 3). Из рис. 3 видно, что кривые 3 и 3a соответствуют зависимостям максимальных и минимальных величин термоэдс увлечения для образца K4 с  $\epsilon \approx 0.1$  от  $D$ . При  $D \geq 0.1 \times 10^{-2}$  см они выходят на насыщение и сливаются в одну линию. В этом пределе доминируют объемные механизмы релаксации, и значения термоэдс слабо зависят от геометрических параметров образцов. Поэтому для образцов с различной концентрацией дислокаций при  $D = 0.1$  см рассчитанные значения термоэдс увлечения совпадают с полученными в [11] для образцов с прямоугольным сечением  $D \times W = 0.15 \times 0.5$  см<sup>2</sup>. Как видно из рис. 3, во всем исследованном интервале  $D$  вклад сдвиговой компоненты значительно превышает вклад быстрой поперечной моды. При  $D = 5 \times 10^{-6}$  см он на 32% больше минимального значения вклада  $\alpha_{\text{drag}}^L$  (см. рис. 1a), а при  $D > 4 \times 10^{-5}$  см он становится больше максимального значения вклада  $\alpha_{\text{drag}}^L$  (см. рис. 3 кривая 4). При переходе к объемным образцам ( $D \geq 1 \times 10^{-1}$  см) вклад сдвиговой компоненты для образца K4 с  $\epsilon \approx 0.1$  превышает  $\alpha_{\text{drag}}^L$  в 4 раза (см. рис. 3 кривые 2b и 3).

В области малых значений  $D$  поперечного сечения  $D \leq 10^{-4}$  см доминирует граничное рассеяние, и кривые, соответствующие различным концентрациям дислокаций, для каждого направления теплового потока сливаются в одну (см. рис. 3 кривые 1, 2, 3). А для больших значений поперечного сечения  $D \geq 1 \times 10^{-3}$  см кривые, соответствующие образцам с различными концентрациями дислокаций, расходятся, и при  $D \geq 1 \times 10^{-1}$  см они выходят на насыщение, соответствующее значениям для объемных образцов (см. рис. 3).

Следует отметить, что с увеличением поперечного сечения нанопроводов максимальная анизотропия термоэдс увлечения, пропорциональная отношению  $\alpha_{\text{drag}}(\theta_{\text{max}})/\alpha_{\text{drag}}^{[111]}$ , изменяется немонотонным образом (см. рис. 4). При переходе от режима кнудсеновского течения фононного газа ( $D < 10^{-5}$  см) к режиму объемных механизмов релаксации ( $D \geq 0.1$  см) она сначала возрастает от 32% при  $D \approx 10^{-6}$  см, достигая максимума 36% при  $D \approx 3 \times 10^{-5}$  см, затем уменьшается и при  $D \geq 0.1$  см исчезает (см. рис. 4). Этот эффект обусловлен тем, что продольные фононы значительно сильнее рассеиваются на электронах, чем медленные поперечные и их относительный вклад уменьшается и изотропизируется значительно быстрее, чем  $\alpha_{\text{drag}}^{t_2}$ . Поэтому минимум термоэдс, в



**Рис. 4.** Зависимости отношения термоэдс  $\alpha_{\text{drag}}(\theta_{\text{max}})/\alpha_{\text{drag}}^{[111]}$  в образцах с квадратным сечением от толщины  $D$ , рассчитанные для кристаллов калия:  $\epsilon = 0$  (кривая 1),  $K5$  для  $\epsilon \approx 0.053$  (кривая 2), для  $\epsilon \approx 0.1$  (кривая 3).

который значительный вклад вносят  $L$ -фононы, убывает быстрее, чем максимум термоэдс, определяемый главным образом вкладом  $t_2$ -моды (см. рис. 2 и 3). В результате анизотропия термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. Причем чем меньше концентрация дислокаций, тем анизотропия — больше (см. рис. 4). Такие величины анизотропии термоэдс вполне доступны экспериментальному определению. Из рис. 4 следует, что анизотропия термоэдс в 30% достигается не только в режиме кнудсеновского течения фононного газа  $D < 10^{-5}$  см, но и при толщинах образцов, на два порядка больших:  $D \approx (0.4-2) \times 10^{-3}$  см. Отметим, что эта особенность анизотропии термоэдс существенно упрощает проблему экспериментальной проверки рассчитанных в настоящей работе эффектов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проанализирована роль сдвиговых волн в термоэдс увлечения нанопроводов калия при низких температурах. Основные результаты работы можно сформулировать следующим образом.

1. Анализ термоэдс увлечения показал, что сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения нанопроводов. По порядку величины он совпадает с вкладом продольных фононов, а в некоторых направлениях превосходит его. Вклад моды  $t_2$  при учете только продольной компоненты в направлениях  $[111]$  оказался на 32% меньше, а при учете сдвиговой компоненты моды  $t_2$  он — на 12% больше, чем вклад продольных фононов.

2. Определены направления, соответствующие максимальным и минимальным значениям термоэдс увлечения нанопроводов. Установлено, что вклады колебательных мод в термоэдс достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов.

3. Показано, что в условиях конкуренции граничного и объемных механизмов релаксации фононов с увеличением поперечного сечения нанопроводов анизотропии термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. Этот эффект обусловлен конкуренцией вкладов  $t_2$ -моды и  $L$ -фононов в термоэдс увлечения в направлениях  $[111]$  и существенно более сильной релаксацией  $L$ -фононов на электронах при увеличении поперечных размеров нанопроводов. Причем величины анизотропии термоэдс, достаточные для экспериментальной проверки, достигаются не только в режиме кнудсеновского течения фононного газа, но и при толщинах образцов на два порядка больших.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема “Функция”, № АААА-А19-119012990095-0).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кулеев И.И., Кулеев И.Г. Фокусировка фононов и анизотропия решеточной теплопроводности кристаллов калия при низких температурах // ФММ. 2018. Т. 119. С. 1203–1209.
2. Кулеев И.И., Кулеев И.Г. Роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения кристаллов калия при низких температурах // ЖЭТФ. 2019. Т. 156. С. 56–70.
3. Kuleyev I.I., Kuleyev I.G. Drag thermopower in nanowires and bulk potassium crystals under the conditions of competition between the boundary and bulk mechanisms of phonon relaxation // J. Phys.: Cond. Matt. 2019. V. 31. 375701(13 pp).
4. Кулеев И.И., Кулеев И.Г. Влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение и температурные зависимости термоэдс в кристаллах калия при низких температурах // ФММ. 2019. Т. 120. С. 1129–1135.
5. Займан Дж. Электроны и фононы. М.: ИИЛ, 1962. 488 с.
6. Блатт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах. М.: ИИЛ, 1971. 470 с.
7. Anselm A.I. Introduction to Semiconductor Theory, Prentice-Hall, New Jersey (1981).
8. MacDonald D.K.C., Pearson W.B. and Templeton I.M. Thermo-Electricity at Low Temperatures. VIII. Thermo-Electricity of the Alkali Metals Below 2 K // Proc. R. Soc. Lond. A 1960. V. 256. P. 334–358.
9. Guenault A.M., MacDonald D.K.C. Electron and phonon scattering thermoelectricity in potassium alloys at very low temperatures // Proc. R. Soc. Lond. A 1961. V. 264. P. 41–59.

10. *Stinson M.R., Fletcher R., Leavens C.R.* Thermomagnetic and thermoelectric properties of potassium // *Phys. Rev. B.* 1979. V. 20. P. 3970–3990.
11. *Fletcher R.* Scattering of phonons by dislocations in potassium // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 36. P. 3042–3051.
12. *Blatt F.J., Schroeder P.A., Foiles C.L., Greig D.* Thermoelectric power of metals. New York and London: Plenum press, 1976.
13. *Кулеев И.И., Кулеев И.Г.* Влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение и температурные зависимости термоэдс в кристаллах калия при низких температурах // *ФММ.* 2020. Т. 121. № 10. С. 1–8.
14. *Zyman J.M.* The thermoelectric power of the alkali metals at low temperatures // *Phil. Mag.* 1959. V. 4. P. 371–379.
15. *Herring C., Vogt E.* Transport and Deformation-Potential Theory for Many-Valley Semiconductors with Anisotropic Scattering // *Phys. Rev.* 1956. V. 101. P. 944–961.
16. *Кардона П.Ю.М.* Основы физики полупроводников, М.: Физматлит, 2002. 560 с.
17. *Гуревич Л.Э.* Термоэлектрические свойства проводников. I // *ЖЭТФ.* 1946. Т.16. С.193.
18. *Kuleyev I.G., Kuleyev I.I., Taldenkov A.N., Inyushkin A.V., Ozhogin V.I., Itoh K.M., Haller E.E.* Normal processes of phonon-phonon scattering and the drag thermal EMF in germanium crystals with isotopic disorder // *JETP.* 2003. V. 96. P. 1078.
19. *Mahan G.D., Lindsay L., Broido D.A.* The Seebeck coefficient and phonon drag in silicon // *J. Appl. Phys.* 2014. V. 116. P. 245102.
20. *Федоров Ф.И.* Теория упругих волн в кристаллах. М.: Наука, 1965. 386 с.
21. *Truel B., Elbaum C., Chick B.B.* Ultrasonic methods in solid state physics. Academic Press, N.Y.–London. 1969. 307 с.
22. *Кулеев И.Г., Кулеев И.И.* Упругие волны в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка // *ФТТ.* 2007. Т. 49. № 3. С. 422–429.
23. *Li D., Wu Y., Kim P., Shi L., Yang P., Majumdar A.* Thermal conductivity of individual silicon nanowires // *Applied Physics Letters.* 2003. V. 83. P. 2934–2936.
24. *Кулеев И.Г., Кулеев И.И., Бахарев С.М., Устинов В.В.* Фокусировка фононов и фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах. Екатеринбург: Изд-во УМЦ УПИ, 2018. 256 с.