



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 114 за 2015 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Волков Ю.А., Воронин Ф.Н.,  
Марков М.Б.**

Приближение Власова для  
газа фононов

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Волков Ю.А., Воронин Ф.Н., Марков М.Б. Приближение Власова для газа фононов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 114. 24 с.

URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-114>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**Ю.А. Волков, Ф. Н. Воронин, М.Б. Марков**

# **Приближение Власова для газа фононов**

**Москва — 2015**

**Волков Ю.А., Воронин Ф.Н., Марков М.Б.**

## **Приближение Власова для газа фононов**

В приближении Власова получена система уравнений самосогласованной динамики газа фононов в поле деформаций. Показано, что в термодинамическом пределе аналогом гидродинамики фононного газа являются уравнения термоупругости.

**Ключевые слова:** самосогласованное поле, уравнение Власова, фононы, упругие деформации

***Yuri Aleksandrovich Volkov, Fedor Nikolaevich Voronin, Mikhail Borisovich Markov***

## **The Vlasov approach in phonon dynamics**

The Vlasov-like equations are obtained to describe the self-consistent dynamics of phonons. It is found that in the thermodynamical limit these equations on the viewpoint of hydrodynamics lead to the thermoelasticity equations.

**Key words:** self-consistent field, Vlasov equation, phonons, elastic deformation

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 14-01-00350 а.

## **Оглавление**

1. Введение.....	3
2. Упругие волны в кристаллах. Гармоническое приближение .....	4
3. Упругие свойства кубических кристаллов .....	5
4. Гиперупругое приближение. Ангармонические поправки .....	9
5. Газ фононов. Приближение Власова.....	13
6. Перенос энергии .....	16
7. Термодинамический предел.....	20
8. Заключение.....	22
Список литературы.....	23

## 1. Введение

Воздействие ионизирующих излучений различной природы на твердые диэлектрики и полупроводники сопровождается множеством эффектов, изменяющих их физические характеристики. В частности, такое воздействие приводит к выделению тепла. Поэтому одним из актуальных направлений при исследованиях взаимодействия излучения с кристаллами является моделирование переноса энергии, выделяющейся в кристаллическом диэлектрике или полупроводнике. Этот процесс определяет также деформации и напряжения, возникающие в процессе релаксации энергии к равновесным значениям.

Перенос тепла в твердых диэлектриках рассматривался Клеменсом [1], Коллоумом для кремния [2] и Холландом для германия [3]. Ими получены теплоемкость и теплопроводность твердых кристаллических диэлектриков и полупроводников (см. также [4]).

Исследования термомеханики кристаллов развивались преимущественно как раздел физики металлов [5]. Исследования термоупругости твердых диэлектриков проводились в основном в рамках модели изотропного тела [6], [7].

В данной работе предложена модель, объединяющая тепловые и механические свойства кристаллических диэлектриков. Распространение тепла и деформаций рассматриваются как две стороны одного и того же процесса – кинетики фононов в поле деформаций. Модель применима и к кристаллическим полупроводникам, если можно пренебречь электронным вкладом в теплоемкость. В термодинамическом пределе модель сводится к классическим уравнениям термоупругости [6],[7],[8].

## 2. Упругие волны в кристаллах. Гармоническое приближение

Пусть  $\mathbf{u} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$  – смещение точки с радиус-вектором  $\mathbf{x}$  при деформациях, а  $\mathbf{x}'(\mathbf{x})$  – положение точки после деформирования. Уравнение движения для упругих волн в кристалле имеет вид [8]

$$\rho \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2} = \sum_\beta \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} \quad . \quad (1)$$

Здесь  $\rho$  – плотность вещества,  $\sigma_{\alpha\beta}$  – тензор механических напряжений,  $t$  – лабораторное время. Уравнение (1) можно записать в замкнутой форме относительно смещений, если выразить напряжения через деформации. В гармоническом приближении плотность энергии деформаций в кристалле имеет вид:

$$W = \frac{1}{2} E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} \quad \alpha, \beta, \mu, \nu = x, y, z, \quad (2)$$

где  $u_{\alpha\beta}$  – тензор деформации

$$u_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad (3)$$

а  $E^{\alpha\beta\mu\nu}$  есть тензор модулей упругости второго порядка. Он обладает определенными свойствами симметрии при перестановке индексов

$$E^{\alpha\beta\mu\nu} = E^{\beta\alpha\mu\nu} = E^{\alpha\beta\nu\mu} = E^{\mu\nu\alpha\beta} \quad . \quad (4)$$

Связь тензора напряжений  $\sigma_{\alpha\beta}$  с тензором деформаций (3) в кристаллах дает обобщенный закон Гука

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\partial W}{\partial u_{\alpha\beta}} = E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\mu\nu} \quad . \quad (5)$$

По повторяющимся индексам проводится суммирование.

Подставляя (5) в уравнение (1), получим уравнения для поля смещений

$$\rho \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2} = E^{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2 u_\nu}{\partial x_\beta \partial x_\mu}. \quad (6)$$

Решение системы уравнений (6) можно искать в виде плоских волн

$$\mathbf{u} = \mathbf{e} \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)] \quad (7)$$

с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и частотой  $\omega(\mathbf{k})$ . Здесь  $\mathbf{e}$  - (единичный) вектор поляризации. После подстановки (7) уравнения (6) принимают вид

$$\rho \omega^2 e_\alpha = E^{\alpha\beta\mu\nu} k_\beta k_\mu e_\nu. \quad (8)$$

Однородная система (8) имеет нетривиальное решение при условии равенства нулю определителя

$$\det \| E^{\alpha\beta\mu\nu} k_\beta k_\mu - \rho \omega^2 \delta_{\alpha\nu} \| = 0. \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет три корня  $\omega_1(\mathbf{k})$ ,  $\omega_2(\mathbf{k})$ ,  $\omega_3(\mathbf{k})$ , определяющие закон дисперсии волн, а система (8) - три решения  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$ ,  $\mathbf{e}_3$ , соответствующие трем различным поляризациям волн. Поляризации  $\mathbf{e}_\ell$ ,  $\ell = 1, 2, 3$  волн с одним и тем же волновым вектором  $\mathbf{k}$  взаимно перпендикулярны. Скорость переноса энергии упругой волной определяется ее групповой скоростью  $\mathbf{v}_g = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$ , которая, вообще говоря, в реальных кристаллах зависит от частоты колебаний.

### 3. Упругие свойства кубических кристаллов

Значительная часть типовых материалов изделий микроэлектроники кристаллизуется в виде кристаллов с кубической симметрией решетки. Известно,

что в этом случае среди всех упругих модулей второго порядка имеется только три независимых модуля [5]. Вместо формулы (2) для более удобного представления Фойгта с двумя индексами для упругих модулей, когда двойной индекс  $\alpha\beta$  заменяется одним индексом от 1 до 6 по схеме:  $11 \rightarrow 1$ ,  $22 \rightarrow 2$ ,  $33 \rightarrow 3$ ,  $23 \rightarrow 4$ ,  $13 \rightarrow 5$ ,  $12 \rightarrow 6$ , т.е.  $C_{11} = E^{xxxx}$ ,  $C_{12} = E^{xyyy}$  и т.д. Матрица  $\hat{C} = C_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, 6$  содержит только независимые компоненты тензора модулей упругости  $E^{\alpha\beta\mu\nu}$  и действует на вектор  $\varepsilon$  из шести компонент,  $\varepsilon = (u_{11}, u_{22}, u_{33}, 2u_{23}, 2u_{13}, 2u_{12})$ . В этих обозначениях имеем  $\sigma = \hat{C}\varepsilon$  для напряжений и  $W = (1/2)\varepsilon\hat{C}\varepsilon$  для энергии. В случае кристаллов кубической симметрии матрица  $\hat{C}$  имеет вид [5], [9]

$$\hat{C} = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{vmatrix}. \quad (10)$$

Из (10) вытекает, что плотность энергии деформаций в кубическом кристалле

$$W = \frac{1}{2}C_{11}(\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{zz}^2) + C_{12}(\varepsilon_{xx}\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{yy}\varepsilon_{zz}) + \frac{1}{2}C_{44}(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2). \quad (11)$$

Пользуясь (11) и определением (5), получим компоненты тензора напряжений

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= C_{11}\varepsilon_{xx} + C_{12}\varepsilon_{yy} + C_{12}\varepsilon_{zz}, \\ \sigma_{yy} &= C_{12}\varepsilon_{xx} + C_{11}\varepsilon_{yy} + C_{12}\varepsilon_{zz}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\sigma_{zz} = C_{12}\varepsilon_{xx} + C_{12}\varepsilon_{yy} + C_{11}\varepsilon_{zz},$$

$$\sigma_{yz} = C_{44}\varepsilon_{yz},$$

$$\sigma_{zx} = C_{44}\varepsilon_{zx},$$

$$\sigma_{xy} = C_{44}\varepsilon_{xy}.$$

Уравнения движения имеют вид

$$\rho\ddot{u}_x = \frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{xz}}{\partial z},$$

$$\rho\ddot{u}_y = \frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{yz}}{\partial z},$$

$$\rho\ddot{u}_z = \frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z}.$$

Подставляя сюда напряжения (12), получим замкнутые уравнения для компонент поля смещений в кубическом кристалле

$$\begin{aligned} \rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= C_{11}\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}\right) + (C_{12} + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x\partial z}\right), \\ \rho\frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= C_{11}\frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}\right) + (C_{12} + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y\partial z}\right), \\ \rho\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= C_{11}\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2}\right) + (C_{12} + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y\partial z}\right). \end{aligned} \quad (13)$$

Если выполнено условие

$$C_{11} = C_{12} + 2C_{44}, \quad (14)$$

то кристалл изотропен. Отклонение от равенства (14) является мерой анизотропии кристалла. Для кремния и германия имеющиеся данные приведены в таблице 1.

Таблица 1

Кристалл	Постоянные упругой жесткости ( $10^{11}$ н/м <sup>2</sup> )		
	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
Si	1.66	0.639	0.796
Ge	1.285	0.483	0.680
Al	1.07	0.607	0.282

В случае изотропного тела уравнения (13) существенно упрощаются

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = C_{44} \Delta \mathbf{u} + (C_{11} - C_{44}) \text{grad div} \mathbf{u}. \quad (15)$$

Уравнения (13) или (15) определяют собственные моды упругих волн, свободно распространяющиеся в кристалле. Одним из решений (15) будет продольная волна  $u_x = u_1 \mathbf{e}_x \exp\{i\alpha t - ikx\}$  в направлении  $\mathbf{e}_x = (1, 0, 0)$ . Дисперсионное соотношение и скорость распространения продольных волн имеют вид

$$\omega = kc_1, \quad c_1 = \sqrt{C_{11}/\rho}. \quad (16)$$

Для продольных волн  $\text{rot} \mathbf{u} = 0$ , т.е. они являются волнами растяжения/сжатия.

Двумя другими решениями являются поперечные волны

$$u_y = u_2 \mathbf{e}_y \exp\{i\alpha t - ikx\}, \quad u_z = u_3 \mathbf{e}_z \exp\{i\alpha t - ikx\}$$

с одной и той же скоростью распространения

$$\omega = kc_{2(3)}, \quad c_2 = c_3 = \sqrt{C_{44}/\rho}. \quad (17)$$

Поперечные волны представляют собой волны сдвига, поскольку для них  $\text{div} \mathbf{u} = 0$ . Для системы (13) решение также можно искать в виде  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0(\mathbf{kx}) \exp(-i\omega t)$ . Здесь разделение на продольные и поперечные волны возможно только для некоторых выделенных направлений: [100] – вдоль главных осей, имеют место формулы (16), (17); [110] – вдоль диагонали грани куба

$$c_1 = \sqrt{(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})/2}, \quad c_2 = \sqrt{(C_{11} - C_{12})/2}, \quad c_3 = \sqrt{C_{44}/\rho}$$

[111],- вдоль пространственной диагонали куба

$$c_1 = \sqrt{(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/3}, \quad c_{2,3} = \sqrt{(C_{11} - C_{12} + C_{44})/3}.$$

Поперечные волны в направлениях [100] и [111] двукратно вырождены. В общем случае произвольно направленного волнового вектора волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными (по отношению к вектору  $\mathbf{k}$ ).

#### 4. Гиперупругое приближение. Ангармонические поправки

Упругие волны, полученные в гармоническом приближении, свободно распространяются по кристаллу и не взаимодействуют друг с другом. Это справедливо только в условиях, близких к равновесным. Выход за рамки гармонического приближения необходим, так как оно не учитывает тепловое расширение тела и, следовательно, деформации с изменением температуры.

В общем случае плотность энергии деформации можно представить в виде ряда, обобщающего (2) [5]:

$$W = E^{\alpha\beta} u_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} + \frac{1}{3} E^{\alpha\beta\mu\nu\eta\xi} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} u_{\eta\xi} + \dots \quad (18)$$

Сохраняя конечное число членов в разложении (18), можно получать различные приближения теории гиперупругости, в том числе, гармоническое приближение. Коэффициенты  $E^{\alpha\beta}$ ,  $E^{\alpha\beta\mu\nu}$  и  $E^{\alpha\beta\mu\nu\eta\xi}$  называются модулями упругости порядка 1, 2, 3, соответственно, и представляют собой постоянные, характеризующие материал. Поскольку тензор  $u_{\alpha\beta}$  симметричен, то модули упругости всех порядков тоже симметричны по отношению к перестановкам индексов, и имеют место соотношения, обобщающие (4)

$$\begin{aligned} E^{\alpha\beta} &= E^{\beta\alpha}, \\ E^{\alpha\beta\mu\nu} &= E^{\beta\alpha\mu\nu} = E^{\alpha\beta\nu\mu} = E^{\mu\nu\alpha\beta}, \\ E^{\alpha\beta\mu\nu\eta\xi} &= E^{\beta\alpha\mu\nu\eta\xi} = E^{\alpha\beta\nu\mu\eta\xi} = E^{\alpha\beta\mu\nu\xi\eta} = \dots \end{aligned}$$

В гиперупругом приближении вместо (5) имеем

$$\sigma_{\alpha\beta} = E^{\alpha\beta} + E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\mu\nu} + E^{\alpha\beta\mu\nu\eta\xi} u_{\mu\nu} u_{\eta\xi} + \dots \quad (19)$$

В формуле (19) источником новых, по сравнению с (5), членов служит ангармоничность колебаний атомов твердого тела. Не выходя за рамки гиперупругого приближения, положив  $E^{\alpha\beta} = P^{\alpha\beta}$ , можно ввести объемные силы  $P^{\alpha\beta}$ , действующие в кристалле. Для кубических и изотропных кристаллов простейшая модель объемных сил имеет вид  $P^{\alpha\beta} = P\delta^{\alpha\beta}$ . Уравнения для поля смещений теперь должны быть записаны с учетом действия объемных сил

$$\rho \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \tilde{E}^{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial u_\nu}{\partial x_\mu} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha}, \quad (20)$$

где упругие модули третьего порядка описывают локальное изменение упругих констант предварительно деформированного материала

$$\tilde{E}^{\alpha\beta\mu\nu} = E^{\alpha\beta\mu\nu} + E^{\alpha\beta\mu\nu\eta\xi} u_{\eta\xi},$$

или, в обозначениях Фойгта

$$\tilde{C}_{ij} = C_{ij} + C_{ijk} \varepsilon_k \quad i, j, k = 1, 2, \dots, 6. \quad (21)$$

Соотношение (21) можно рассматривать как определение модулей третьего порядка. В модели изотропного тела имеется три независимых модуля третьего порядка, а в случае кубического кристалла – шесть (см. таблицу Таблица 2). Как следует из таблицы Таблица 2 все модули отрицательны (в скобках даны расчетные значения модулей из работ [10], [11]).

Таблица 2

Упругие модули третьего порядка ( $10^{11}$ Н/м <sup>2</sup> )	Si	Ge
$C_{111}$	-8.34±0.11(-8.21)	-7.10 (-7.38)
$C_{112}$	-5.31±0.32(-4.45)	-3.89 (-3.54)
$C_{123}$	-0.02±0.18 (-0.64)	-0.18 (-0.26)
$C_{144}$	-0.95±0.24(+0.14)	-0.23 (-0.10)
$C_{166}$	-2.96±0.12(-3.43)	-2.92 (-3.08)
$C_{456}$	-0.074±0.22(-0.33)	-0.53 (-0.28)

Скорость звука в деформированном состоянии является локальной величиной, зависящей от точки наблюдения  $\mathbf{x}$ . Она отличается от скорости звука, определенной ранее формулами (16), (17). В частности, для изотропного вещества получим

$$v_1 = c_s(1) \sqrt{1 - \sum_j \frac{C_{11j}}{C_{11}} \varepsilon_j} \approx c_1 \left( 1 - \frac{1}{2} \sum_j \frac{C_{11j}}{C_{11}} \varepsilon_j \right), \quad (22)$$

$$v_{2,3} = c_s(2,3) \sqrt{1 - \sum_j \frac{C_{44j}}{C_{44}} \varepsilon_j} \approx c_{2,3} \left( 1 - \frac{1}{2} \sum_j \frac{C_{44j}}{C_{44}} \varepsilon_j \right), \quad (23)$$

где  $c_s(\ell)$  - «невозмущенная» скорость звука для поляризации  $\ell$ .

Следуя принятой в физике твердого тела терминологии, определим константы потенциала деформации

$$b_1^j = \frac{1}{2} \frac{C_{11j}}{C_{11}}, \quad b_2^j = b_3^j = \frac{1}{2} \frac{C_{44j}}{C_{44}}, \quad j=1,2,\dots,6. \quad (24)$$

Эти же величины можно представить в виде симметричной матрицы коэффициентов  $b_\ell^{\alpha\beta}$ ,  $\ell=1,2,3$ ,  $\alpha,\beta=x,y,z$ . Используя коэффициенты (24), запишем скорость звука в виде

$$v_\ell = c_s(\ell) \left( 1 - b_\ell^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \right). \quad (25)$$

Из определения коэффициентов  $b_\ell^{\alpha\beta}$  вытекает их пропорциональность коэффициентам термоупругости  $a^{\alpha\beta}$ , а именно,  $b^{\alpha\beta} \propto (K/C_V) a^{\alpha\beta}$ , где  $K = 1/3(C_{11} + 2C_{12})$ , - модуль всестороннего сжатия, а  $C_V$  - теплоемкость единицы объема вещества. Формулу (25) можно существенно упростить, заметив, что для изотропного вещества и кристаллов кубической симметрии  $a^{\alpha\beta} = a \delta^{\alpha\beta}$ , где  $a$  - коэффициент температурного расширения, и тогда

$$v_\ell = c_s(\ell) (1 - b \operatorname{div} \mathbf{u}) \quad (26)$$

с единственной константой взаимодействия  $b = aK/C_V$ , не зависящей от поляризации.

Уравнение (20) имеет смысл и в случае деформаций, не зависящих от времени

$$E^{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2 u_\nu}{\partial x_\beta \partial x_\mu} = F_\alpha. \quad (27)$$

Для неограниченной среды его решение можно представить в виде

$$u_\alpha(\mathbf{x}) = -\int G_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') F_\beta(\mathbf{x}') d\mathbf{x}',$$

где  $G_{\alpha\beta}$  - тензор Грина уравнения (27). В случае изотропного тела

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi C_{44}} \left( \frac{\delta_{\alpha\beta}}{|\mathbf{x}|} - \frac{1}{2} \frac{C_{11} - C_{44}}{C_{11}} \frac{\partial^2 |\mathbf{x}|}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right). \quad (28)$$

Все члены в правой части (28) имеют порядок  $\propto 1/|\mathbf{x}|$ , т.е. поле смещений  $\mathbf{u}$  является классическим примером дальнедействующего поля. Аналогичный вывод справедлив и для уравнений (13), т.к. асимптотическое поведение тензора Грина то же самое для кристаллов произвольных симметрий[12]. Это и служит основанием для описания взаимодействия волн и деформаций в рамках приближения Власова.

## 5. Газ фононов. Приближение Власова

Каждой упругой волне  $\exp(i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{x})$  с дисперсионным соотношением  $\omega = \omega_\ell(\mathbf{k})$  поставим в соответствие квазичастицу (фонон поляризации  $\ell$ ) с квазиимпульсом  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  и энергией  $\varepsilon = \hbar\omega_\ell(\mathbf{k})$ ,  $\ell = 1, 2, 3$ . Функцию распределения фононов  $f_\ell(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  определим следующим образом: величина

$$f_\ell(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \frac{d\mathbf{x}d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

дает среднее число фононов поляризации  $\ell$  в элементе фазового объема  $d\mathbf{x}d\mathbf{p}$ , содержащем точку  $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ . Изменение функции распределения со временем дается уравнением

$$\frac{\partial f_\ell}{\partial t} + \frac{\partial H_\ell}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial f_\ell}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial H_\ell}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial f_\ell}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (29)$$

где  $H_\ell(\mathbf{p})$  - энергия фонона. Так как фонон не имеет массы, его энергия линейно связана с импульсом

$$H_{0,\ell}(\mathbf{p}) = pc_s(\ell), \quad \mathbf{p} = \frac{\hbar\omega_\ell}{c_s(\ell)}\mathbf{\Omega}, \quad \mathbf{c}_s = c_s(\ell)\mathbf{\Omega} \quad (30)$$

Здесь  $\mathbf{\Omega}$  - единичный вектор угловых направлений в импульсном пространстве. Из (30) следует, что

$$\frac{\partial f_\ell}{\partial t} + c_s\mathbf{\Omega} \frac{\partial f_\ell}{\partial \mathbf{x}} = 0,$$

т.е. фононы движутся свободно, без взаимодействия друг с другом. Полная энергия фононного газа сводится к сумме энергий отдельных квазичастиц

$$H_0 = \sum_\ell \int_V d\mathbf{x} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} H_\ell(\mathbf{p}) f_\ell(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \sum_\ell \int_V d\mathbf{x} \int \frac{\omega^2 d\omega d\mathbf{\Omega}}{(2\pi c_s(\ell))^3} \hbar\omega f_\ell(\mathbf{x}, \omega, \mathbf{\Omega})$$

как и в случае идеального газа. В следующем приближении энергия фононов должна определяться с учетом их взаимодействия. Здесь фонон следует рассматривать как квазичастицу, обладающую траекторией и движущуюся в поле деформаций. Взаимодействие осуществляется через поле деформаций с энерги-

ей взаимодействия (индекс поляризации в дальнейшем будем опускать везде, где это возможно)

$$H_1 = - \int_V d\mathbf{x} u_{\alpha\beta} P^{\alpha\beta},$$

т.е. полная энергия может быть представлена в виде ряда по степеням параметра  $b$

$$H = H_0 + b^2 H_1 + \dots \quad (31)$$

Для того чтобы получить поправки в уравнение свободного движения, воспользуемся формулой Рейсленда [13]

$$H = pc_s(1 - b \operatorname{div} \mathbf{u}), \quad (32)$$

где  $b$ - параметр Грюнайзена. Подстановка (32) в (29) дает

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_s(1 - b \operatorname{div} \mathbf{u}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + b(pc_s) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (33)$$

Обозначим  $\phi = \operatorname{div} \mathbf{u}$  – дилатация и введем групповую скорость фононов поляризации  $\ell$

$$\mathbf{v}_\ell = \frac{\partial H_\ell}{\partial \mathbf{p}} = c_s(\ell) \frac{\mathbf{p}}{p} (1 - b\phi), \quad v_\ell = |\mathbf{v}_\ell| = c_s(\ell) (1 - b\phi).$$

В этих обозначениях уравнение (33) принимает обычный вид

$$\frac{\partial f_\ell}{\partial t} + \mathbf{v}_\ell \frac{\partial f_\ell}{\partial \mathbf{x}} + bpc_s(\ell) \nabla \phi \frac{\partial f_\ell}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (34)$$

Уравнение (34) дополняется уравнениями для поля деформаций. В модели изотропного тела имеем

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} - C_{44} \Delta \mathbf{u} - (C_{11} - C_{44}) \text{grad div } \mathbf{u} = -b \nabla \sum_{\ell} \int p v_{\ell} f_{\ell}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (35)$$

где в правой части (35) стоит радиационное давление газа фононов

$$P = \sum_{\ell} \int p v_{\ell} f_{\ell}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (36)$$

Из (35) следует, что для изотропного тела можно получить замкнутое уравнение для дилатации, применив к обеим частям (35) операцию дивергенции

$$\rho \ddot{\phi} - C_{11} \nabla \phi = -b \Delta P.$$

В случае кубических кристаллов (13) замкнутого уравнения для дилатации получить нельзя, так как волны не являются ни чисто продольными ни чисто поперечными. При  $b \rightarrow 0$  уравнение (34) переходит в уравнение свободного движения (29), а уравнение (35) определяет не взаимодействующие друг с другом упругие волны.

## 6. Перенос энергии

Обозначим  $w$ - плотность энергии и  $\mathbf{q}$  плотность потока энергии фононного газа

$$w = \sum_{\ell} \int_B p v_{\ell} f_{\ell} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \mathbf{q} = \sum_{\ell} \int_B \mathbf{v}_{\ell} p v_{\ell} f_{\ell} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (37)$$

Поток энергии, вообще говоря, не может быть получен в рамках системы уравнений Власова (34), (35), так как все процессы в этом приближении являются нормальными, т.е. сохраняющими полный квазиимпульс фононов. При таком рассмотрении теплоемкость кристалла будет бесконечной, а термосопротивление кристалла равно нулю. Конечные значения этих величин получаются при наличии процессов с перебросом, т.е. с приведением квазиимпульса в зону Бриллюэна [14]. Например, простейшая трехфононная реакция распада/слияния фононов требует выполнения условий (те же соотношения справедливы для взаимодействий с участием любого числа фононов)

$$\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 \Leftrightarrow \hbar\omega_3, \hbar\mathbf{k}_1 + \hbar\mathbf{k}_2 \Leftrightarrow \hbar\mathbf{k}_3.$$

Здесь волновые вектора всех квазичастиц лежат в зоне Бриллюэна ( $N$ -процесс, normal). Если же волновые вектора лежат вне зоны Бриллюэна ( $U$ -процесс, umklap), то

$$\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 \Leftrightarrow \hbar\omega_3, \hbar\mathbf{k}_1 + \hbar\mathbf{k}_2 \Leftrightarrow \hbar\mathbf{k}_3 + \hbar\mathbf{g},$$

где  $\mathbf{g}$  - вектор обратной решетки. Здесь существенно наличие решетки, если тело рассматривается как сплошная среда, то  $\mathbf{g} \equiv 0$ .  $U$ -процессы приводят к восстановлению равновесного распределения фононов и к конечной величине термического сопротивления кристалла. Источником  $U$ -процессов служит ангармоничность колебаний атомов, в частности кубические члены в разложении упругой энергии (18).

Для учета процессов слияния/распада фононов будем рассматривать уравнение Больцмана с интегралом рассеяния в приближении времени релаксации

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + bpc_s \nabla \phi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau(\omega)}. \quad (38)$$

Здесь  $f_0$  - равновесная функция распределения фононов. Интеграл рассеяния в правой части (38) сохраняет энергию фононов, но не сохраняет их квазиимпульс. Частоты рассеяния включают в себя как нормальные процессы рассеяния, так и процессы с перебросом

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau^N} + \frac{1}{\tau^U}.$$

Следуя [15], представим функцию распределения в виде  $f = f_s + f_a$ , где  $f_s(-\mathbf{p}) = f_s(\mathbf{p})$  - симметричная по импульсам часть функции распределения, а  $f_a(-\mathbf{p}) = -f_a(\mathbf{p})$  - антисимметричная часть. Это представление удобно тем, что термодинамические величины определяются  $f_s$ , а потоки через  $f_a$ :

$$w = \int_B p v f_s \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \mathbf{q} = \int_B \mathbf{v} p v f_a \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Интегрирование по квазиимпульсам здесь ведётся по зоне Бриллюэна.

Уравнение (38) разделяется на симметричную и антисимметричную части

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{x}} + bpc_s \nabla \phi \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_s - f_0}{\tau(\omega)}, \quad (39)$$

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + bpc_s \nabla \phi \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_a}{\tau(\omega)}. \quad (40)$$

Симметричная часть функции распределения, зависящая только от энергии, может быть найдена из стационарного уравнения (39). Она имеет вид

$$f_s = \psi(pc_s(1-\phi)/\kappa_B T) = \psi(pv/\kappa_B T), \quad (41)$$

где  $\psi$  - произвольная неотрицательная функция энергии,  $T$  - температура,  $\kappa_B$  - константа Больцмана. Сама температура находится из условия сохранения энергии при рассеянии

$$\int_B \frac{pvf_s}{\tau(\omega)} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \int_B \frac{pvf_0}{\tau(\omega)} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Если температура постоянна, то  $f_s = f_0$ ,  $f_a = 0$ . Антисимметричная часть функции распределения появится, как только температура (или плотность энергии) станет функцией времени и координат. Тогда, учитывая (41), система уравнений (39), (40) преобразуется следующим образом

$$\frac{\partial f_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{x}} + bpc_s \nabla \phi \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_s - f_0}{\tau(\omega)}, \quad (42)$$

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{f_a}{\tau(\omega)}. \quad (43)$$

Умножая уравнение (42) на энергию  $pv_\ell$ , интегрируя по квазиимпульсам по зоне Бриллюэна и суммируя по всем поляризациям, получим

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{x}} = 0. \quad (44)$$

Из уравнения (43) для антисимметричной части функции распределения получим

$$f_a = -(1 - \exp(t/\tau)) \tau \mathbf{v} \left( \mathbf{v} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right) \frac{\partial f_0}{\partial T}. \quad (45)$$

Подстановка  $f_a$  из (45) в выражение для потока дает

$$\mathbf{q} = -(1 - \exp(-t/\tau)) \int_B \tau(\omega(p)) p v \mathbf{v} \left( \mathbf{v} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right) \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (46)$$

Усредняя по угловым переменным и опуская несущественный (пока) временной множитель, приведем (46) к окончательному виду

$$\mathbf{q} = -\frac{1}{3} \lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}}, \quad \lambda = \int_B \tau(p v) p v^3 \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (47)$$

где  $\lambda$  - термическая проводимость кристалла. Формулу (47) для плотности потока энергии можно преобразовать следующим образом

$$\mathbf{q} = -\frac{1}{3} v \Lambda \mathbf{C} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}}, \quad (48)$$

если ввести теплоемкость  $\mathbf{C}$  фононного газа и среднюю длину пробега по Росселанду  $\Lambda$

$$\mathbf{C} = \int_B p v \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \Lambda = \int_B (v\tau) p v \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} / \int_B p v \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (49)$$

Представление потока энергии в виде (48), (49) во многих отношениях гораздо удобнее, так как содержит измеримые величины.

## 7. Термодинамический предел

Как следует из вычислений предыдущего раздела, функция распределения имеет вид

$$f = f_0(p v / \kappa_B T) + \tau \mathbf{v} \left( \mathbf{v} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right) \frac{\partial f_0(p v / \kappa_B T)}{\partial T},$$

где функция  $f_0$  зависит только от энергии. Под термодинамическим пределом будем понимать выполнение условий:

- распределение Планка  $f_0$  дает равновесное распределение фононов;
- дисперсионные зависимости имеют вид  $\hbar\omega_\ell = p v_\ell$ ;
- дебаевская плотность состояний фононов поляризации  $\ell$

$$D(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{\pi^2 v_\ell^3}, \quad \omega \leq \omega_{\max};$$

- постоянная Грюнайзена имеет вид  $b = aK/\mathbf{C}$ .

Тогда термическая проводимость (47) и теплоемкость (49) кристалла имеют вид

$$\mathbf{C} = \kappa_B \int_0^{\omega_{\max}} \frac{(\hbar\omega/\kappa_B T) \exp(\hbar\omega/\kappa_B T)}{[\exp(\hbar\omega/\kappa_B T) - 1]^2} D(\omega) d\omega = \frac{\kappa_B}{2\pi^2 v_\ell^3} \left( \frac{\kappa_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{\eta^4 \exp(\eta)}{[\exp(\eta) - 1]^2} d\eta, \quad (50)$$

$$\lambda = \frac{\kappa_B}{2\pi^2 v_\ell} \left( \frac{\kappa_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{\tau(\eta \kappa_B T / \hbar) \eta^4 \exp(\eta)}{[\exp(\eta) - 1]^2} d\eta, \quad (51)$$

где  $\Theta_D = \hbar\omega_{\max}/\kappa_B$  - температура Дебая,  $\eta = \hbar\omega/\kappa_B T$ . Из (50), (51) следует, что

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_0 / (1 - b\phi)^3, \quad w = w_0 / (1 - b\phi)^3, \quad (52)$$

$$\lambda = \lambda_0 / (1 - b\phi), \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}_0 / (1 - b\phi). \quad (53)$$

Здесь  $\mathbf{C}_0$  и  $\lambda_0$  - теплоемкость и теплопроводность кристаллических диэлектриков, полученные Клеменсом [1] и Коллуэем [2], а  $w_0$  и  $\mathbf{q}_0$  - плотность и поток

энергии в отсутствие деформаций ( $b \rightarrow 0$ ). Удерживая в (52) и (53) только линейные поправки и подставляя в (44), получим

$$\frac{\partial T}{\partial t} + 3bT\dot{\phi} + \frac{\lambda_0 b}{\mathbf{C}_0} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\lambda_0}{\mathbf{C}_0} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}}, \quad (54)$$

где  $\lambda_0/\mathbf{C}_0$  - коэффициент температуропроводности. Второй и третий члены в левой части (54) отвечают затуханию термоупругих волн. Рассмотрим теперь ту часть системы уравнений, которая связана с деформациями, например (35). Градиент давления в правой части (35) для распределения Планка вычисляется просто

$$\nabla P(\mathbf{x}) = \mathbf{C} \nabla T(\mathbf{x}).$$

Отсюда получается система уравнений, связывающая распределение деформаций и температур. Учитывая, что в термодинамическом пределе параметр Грюнайзена  $b = aK/\mathbf{C}$  [13], получим

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} - C_{44} \Delta \mathbf{w} - (C_{11} - C_{44}) \text{grad div } \mathbf{w} = -aK \nabla T. \quad (55)$$

Уравнение (55) – это уравнение для деформаций с изменением температуры, а система уравнений (54), (55) – это уравнения термоупругих волн в форме, полученной Био [6,7]. С точки зрения кинетической теории уравнение (55) есть модель «серого» вещества, так как ее параметры не зависят от частоты колебаний.

## 8. Заключение

Поглощение и трансформация энергии ионизирующих излучений твердыми диэлектриками и полупроводниками имеет несколько стадий. Первоначально, энергия аккумулируется в электронах проводимости. Торможение электронов, вызванное их рассеянием на неидеальностях решетки, приводит к пе-

пераспределению избыточной энергии, в частности, к образованию большого количества неравновесных оптических фононов. Энергию, содержащуюся в оптических фононах, уже можно рассматривать как источник тепла в уравнениях (42)-(43) и, соответственно, в уравнениях термоупругости. Разработанная модель будет применена для исследования термомеханических эффектов в изделиях микро- и нанoeлектроники, обусловленных воздействием ионизирующих излучений.

### Список литературы

1. Klemens P.G. Thermal conductivity and lattice vibration modes. Encyclopedia of Physics, V.14, Springer-Verlag, Berlin, 1956, p. 198.
2. Callaway J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures // Phys. Rev. 1959.v. 113. №3. p. 1046-1051.
3. Holland M.G. Analysis of lattice thermal conductivity // Phys. Rev. 1963. v. 132. № 6. p. 2461-2471
4. Дмитриев А.С. Тепловые процессы в наноструктурах. М.: Издательский дом МЭИ, 2012, 303с.
5. Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах. / пер. с англ. М: Мир, 1981, 439 с.
6. Biot M.A. Thermoelasticity and Irreversible Thermodynamics // J. Appl. Phys. 1956. v. 27. No. 3. pp. 240-253.
7. Новацкий В. Теория упругости. / пер. с польск. М.: Мир, 1975, 872 с.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. М.:Наука, 1978, 248 с.

9. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. / пер. с англ. М: Наука, 1978, 792 с.
10. Keating P.N. Theory of the third-order elastic constants of diamond-like crystals // Phys. Rev. 1966. v. 149. №2. p. 674-678.
11. Philip J., Breazeale M.A. Temperature variation of some combinations of thirdorder elastic constants of silicon between 300 and 3K // J. Appl. Phys. 1981. v. 52. p. 3383-3387.
12. Лифшиц И.М. Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем. О построении тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упругоанизотропной среды/ М.: Наука, 1987, с. 349.
13. Рейсленд Дж. Физика фононов. / пер. с англ. М.: Мир, 1975, 365с.
14. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел. / пер. с англ. М: Наука, 1956.
15. Конуэлл Э. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях / пер. с англ. М.: Мир, 1970, 570 с.