

# Низкотемпературный фононный транспорт в 3D-микрконтактах (Обзор)

А. Фегер

*Университет им. П.Й. Шафарика, Парк Ангелинум 9, Кошице, Словакия*

А.А. Мамалуй, А.Я. Дульфан

*Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»  
ул. Фрунзе, 21, г. Харьков, 61002, Украина*

Е.С. Сыркин, А.Г. Шкорбатов

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина  
E-mail: syrkin@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 24 декабря 2004 г., после переработки 13 июня 2005 г.

Обзор посвящен описанию неравновесных систем носителей, релаксационных и кинетических явлений в трехмерных микрконтактах. Основное внимание уделяется описанию фононной системы, которая существенно модифицируется в условиях баллистического транспорта. В таких системах потоки энергии ограничены присутствием слабосвязанных слоев примесных атомов, планарных дефектов или микроскопическими размерами контактов. Малые размеры микрконтактов, от нескольких нанометров до 1000 нм, позволяют исследовать низкотемпературный транспорт тепла и перенос заряда в масштабах, меньших, чем характерные длины неупругого рассеяния. Проанализирован механизм транспорта фононов при наличии поверхности раздела, рассмотрены различные модели планарного дефекта. Изучены особенности интерфейсного фононного транспорта, при котором коэффициенты переноса определяются не процессами рассеяния в объеме массивного кристалла, а свойствами межкристаллической границы. Детально рассмотрена квантовая фононная теплопроводность точечных контактов.

Огляд присвячено опису нерівноважних систем носіїв, релаксаційних і кінетичних явищ у тривимірних мікроконтактах. Основна увага приділяється опису фононної системи, що істотно модифікується в умовах балістичного транспорту. У таких системах потоки енергії обмежені присутністю слабкозв'язаних шарів домішкових атомів, планарних дефектів або микроскопічними розмірами контактів. Малі розміри мікроконтактів, від декількох нанометрів до 1000 нм, дозволяють досліджувати низькотемпературний транспорт тепла і перенос заряду в масштабах, менших, ніж характерні довжини непружного розсіювання. Проаналізовано механізм транспорту фононів при наявності поверхні розділу, розглянуто різні моделі планарного дефекту. Вивчено особливості інтерфейсного фононного транспорту, при якому коефіцієнти переносу визначаються не процесами розсіювання в об'ємі масивного кристала, а властивостями межкристалічної границі. Детально розглянуто квантову фононну теплопровідність крапкових контактів.

PACS: 63.20.-e, 68.65.+g

## Содержание

Введение . . . . .	1212
1. Точечные контакты — актуальный объект физики твердого тела . . . . .	1213
1.1. Баллистический транспорт в наноконтактах . . . . .	1213
1.2. Адиабатический метод измерения потока тепла в контакте . . . . .	1214

1.3. Измерение теплопроводности контактов адиабатическим методом . . . . .	1215
2. Фононный транспорт в 3D-наноконтактах . . . . .	1216
2.1. Неравновесное состояние фононной системы в контакте . . . . .	1216
2.2. Поток фононов в приближении геометрической оптики . . . . .	1216
2.3. Низкотемпературный баллистический транспорт фононов . . . . .	1217
2.4. Восстановление колебательного спектра по температурной зависимости баллистического теплового потока . . . . .	1218
3. Рассеяние фононов в приконтактной области . . . . .	1218
3.1. Упругое рассеяние фононов в контакте . . . . .	1218
3.2. Фонон-фононное рассеяние в точечных контактах . . . . .	1220
3.3. Фононный транспорт в микроконтактах металл-диэлектрик . . . . .	1222
3.3.1. Баллистический режим теплопереноса . . . . .	1223
3.3.2. Фонон-электронное рассеяние в баллистическом режиме . . . . .	1223
3.3.3. Диффузионный режим переноса фононов . . . . .	1225
4. Квантовый транспорт фононов в 3D-контактах . . . . .	1226
4.1. Дифракция упругих волн на отверстиях точечного 3D-контакта . . . . .	1226
4.2. Квантовая фононная теплопроводность контакта . . . . .	1227
4.3. Модель «растекания» для квантовой теплопроводности контактов в виде канала . . . . .	1229
5. Рассеяние фононов на плоских дефектах кристаллической решетки . . . . .	1231
5.1. Динамика поверхности кристалла с адсорбированным монослоем . . . . .	1231
5.2. Резонансное взаимодействие упругих волн с двумерным дефектом на границе . . . . .	1233
5.3. Многоканальное интерфейсное рассеяние в точечном контакте . . . . .	1234
6. Модификация фононного спектра в наноструктурах . . . . .	1237
6.1. Вклад границ в фононные спектральные плотности ограниченных систем . . . . .	1237
6.2. Спектр электрон-фононного взаимодействия в мезоконтактах . . . . .	1239
Заключение . . . . .	1240
Список литературы . . . . .	1241

## Введение

Стремление к миниатюризации элементов электронных приборов, сенсорных и микромеханических устройств привело к развитию различных вариантов нанотехнологий. Эти технологии позволяют на мезоскопическом или атомном уровне конструировать композитные материалы и объекты, включающие межкристаллические границы, области сильной анизотропии или пониженной размерности. Как правило, представляет интерес процесс распространения колебаний в таких системах. При этом оказывается, что процессы переноса и кинетические эффекты существенно модифицируются, особенно в области низких температур, по сравнению с их проявлениями в макроскопических однородных твердотельных образцах. Дело в том, что при низких температурах (десятки градусов Кельвина и ниже) характерные длины неупругого рассеяния носителей заряда и тепла начинают превосходить размеры элементов наноструктур. Реализуются различные варианты баллистического транспорта в наноструктурах.

В данном обзоре рассмотрены в основном кристаллические наносистемы, имеющие вид трехмерных диэлектрических или проводящих микромостиков, соединяющих массивные кристаллы. Такие системы часто называют точечными контактами, или микроконтактами. Эти структуры, как правило, включают границы раздела или мономолекулярные примесные слои, которые описываются моделью «планарного дефекта». Малые размеры микроконтактов, от нескольких нанометров до 1000 нм, позволяют исследовать низкотемпературный транспорт тепла и перенос заряда в масштабах, меньших, чем характерные длины неупругого рассеяния.

Точечные контакты, реализованные как микроскопические области короткого замыкания между массивными проводниками, были введены в научный обиход в работе [1]. Исследование эффектов слабого неупругого рассеяния в зоне токопроводящего точечного контакта привело к развитию метода микроконтактной спектроскопии электрон-фононного взаимодействия [2–6]. Баллистическая электронная теплопроводность металлического микроконтакта впервые измерена в [7]. Баллистический

транспорт фононов в микроконтактах впервые экспериментально исследован в [8–10]. Теоретическое предсказание указанных эффектов содержится в работах [11–14].

Точечные контакты оказались уникальными физическими приборами, с помощью которых можно изучать транспортные явления в условиях сильной неравновесности электронной и фононной систем. В точечных контактах перепад электрохимического потенциала или температуры происходит на расстояниях порядка диаметра контакта  $d$ . Попытка реализовать аналогичные неравновесные условия в макроскопических образцах привела бы в большинстве случаев к разрушению исследуемых образцов. Использование точечных контактов позволяет изучать качественную модификацию основных кинетических явлений по сравнению с аналогичными процессами в массивных проводниках и диэлектриках.

Данный обзор посвящен описанию неравновесных систем носителей, релаксационных и кинетических явлений в наноструктурах. Основное внимание уделяется описанию фононной системы, которая существенно модифицируется в условиях баллистического транспорта. Общая характеристика транспортных явлений в наноструктурах, содержащих плоские дефектные слои, границы раздела, точечные контакты, а также в сильно анизотропных кристаллах и системах пониженной размерности, заключается в том, что в перечисленных случаях процессы переноса происходят в системах, содержащих слабые связи. Потоки энергии ограничены присутствием слабосвязанных слоев примесных атомов, планарных дефектов или микроскопическими размерами контактов.

Проанализирован механизм транспорта фононов при наличии поверхности, рассмотрены различные модели планарного дефекта. Изучены особенности интерфейсного фононного транспорта, при котором коэффициенты переноса определяются не процессами рассеяния в объеме массивного кристалла, а свойствами межкристаллической границы. Детально рассмотрена квантовая фононная теплопроводность точечных контактов. Изложение начинается с рассмотрения баллистического транспорта фононов, затем включаются в рассмотрение различные процессы рассеяния фононов и описывается теплопроводность для диэлектрических микроконтактов в различных транспортных режимах. Рассмотрены результаты перспективных исследований фононного транспорта в двумерных и молекулярных контактах. Описан эффект модификации фононного спектра в мезоскопических контактах [15]. Заметим, что в имеющейся обширной обзорной литературе, посвященной переносу тепла (см., например,

[16–22]), отсутствует систематическое изложение экспериментальных и теоретических работ, касающихся низкотемпературного транспорта фононов в наноструктурах, хотя эта область исследований продолжает интенсивно развиваться [23–29]. Между тем именно в низкотемпературной области достигнуты наибольшие успехи в адекватном теоретическом описании эффектов, связанных с фононным транспортом. Поэтому одна из основных целей настоящего обзора — восполнить этот пробел в обзорной литературе, и с этим связано то обстоятельство, что некоторые из рассматриваемых проблем приходится описывать более детально.

## 1. Точечные контакты — актуальный объект физики твердого тела

### 1.1. Баллистический транспорт в наноконтактах

Уменьшение размеров наноструктур приводит к возникновению размерных транспортных эффектов, связанных с соотношением между геометрическими характеристиками структур и длинами рассеяния, соответствующими различным механизмам рассеяния носителей. Баллистический транспорт заряда и тепла устанавливается в точечных контактах в области низких температур для значений диаметра контакта от 1000 нм до 10 нм [12]. При этих условиях длины неупругого рассеяния носителей заряда и тепла становятся большими по сравнению с размерами контакта. Когда размеры контакта снижаются до 10 нм, возникают эффекты размерного квантования фононов в контакте [10,14]. Влияние нарушения регулярной структуры кристаллической решетки в области контакта на вид колебательного спектра атомов становится существенным при размерах контакта от 10 нм до 1 нм [15]. Этот эффект относится к области мезоскопических явлений.

В настоящее время установлено, что баллистический транспорт тепла, рассчитанный в работах [9,12], реализуется в диэлектрических и полупроводниковых точечных контактах, а также в контактах металл–диэлектрик [23–29].

Для получения точечных контактов были предложены разнообразные способы [5,30]. Для исследования электронного и фононного транспорта в микроконтактах используют метод «иглы и накопальни» [31], пересекающихся призм [32,33] и метод излома [34,35]. В микроконтактах электроны и фононы не могут распространяться через поверхность вакуумного зазора, ограничивающего площадь контакта.

Специфической особенностью транспортных явлений в точечных контактах является возможность создания сильнонеравновесных состояний элек-

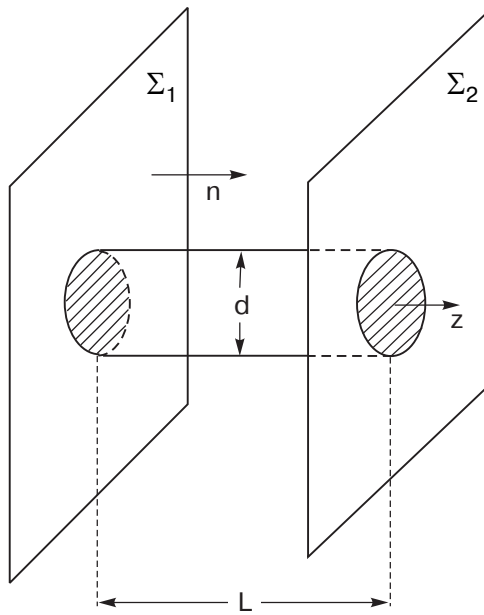


Рис. 1. Схема микроконтакта в виде цилиндрической закоротки в вакуумном зазоре между поверхностями  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$ .

трон-фононной системы в области сужения. Если поддерживается разница температур на берегах контакта, то фононная система становится сильнонеравновесной.

Неравновесная фононная система может быть реализована в микроконтакте, размеры которого малы по сравнению с длиной фонон-фононной релаксации  $l_{ph-ph}$ . Баллистический фононный транспорт в микроконтактах реализуется, если длина релаксации квазиимпульса велика по сравнению с диаметром контакта. Схематически модель такого контакта представлена на рис. 1.

Рассмотрим ситуацию, когда объемные берега контактов имеют разные температуры  $T_1$  и  $T_2$ . При этом группы электронов и фононов в области контактов характеризуются функциями, распределения которых имеют различные температуры  $T_1$  и  $T_2$ . Средняя температура в контакте не может быть установлена, поскольку интенсивность неупругого рассеяния мала ( $d \ll l_{ph-ph}$ ). Низкотемпературная теплопроводность контакта дает ясное свидетельство дифракции фононов в точечных контактах, которая позволяет оценить параметры геометрии контактов. Изготовление точечных контактов с помощью давления микроскопической иглы приводит к появлению поликонтактной структуры. Таким образом, можно рассматривать тепловой поток между берегами контакта как результат транспорта через некоторое число параллельных контактов.

### 1.2. Адиабатический метод измерения потока тепла в контакте

Простой адиабатический метод измерения теплового потока в диэлектрических контактах предложен в работе [8]. Этим методом измеряли тепловой поток через контакты NaCl–NaCl [8,9,36] и KBr–KBr [37]. Микроконтакты создавали между двумя монокристаллами NaCl, причем нижний монокристалл NaCl-1 был подвешен в вакууме в адиабатических условиях. Верхний монокристалл NaCl-2 через медный теплопровод контактировал с резервуаром, заполненным жидким гелием. С помощью внешней регулировки прижима можно было изменять прижимную силу между плоскостью [001] кристалла NaCl-2 и трехгранным углом в направлении [111] кристалла NaCl-1, а тем самым — и размер микроконтакта  $d$ .

Для обеспечения адиабатических условий оба образца находились в вакууме при давлении менее  $10^{-4}$  Па и были окружены тепловым экраном. Для нагрева образца NaCl-1 до температуры 80 К был использован наклеенный на нижнюю поверхность образца электрический нагреватель-тензометр.

После выключения нагревателя снимали кривую охлаждения образца NaCl-1, т.е. находили временную зависимость  $T_1(t)$ , и с помощью численного дифференцирования вычисляли производную  $dT_1/dt$  как функцию  $T_1$ . Используя термодинамическое определение теплоемкости, тепловой поток  $\dot{Q}(T_1)$  можно вычислить согласно уравнению

$$\dot{Q}(T_1) = C(T_1)(dT_1/dt), \quad (1)$$

где  $C(T_1)$  — теплоемкость образца NaCl-1 при температуре  $T_1$ .

При такой постановке эксперимента часть теплового потока обусловлена паразитным потоком через электрические провода, нейлоновые нити, а также через остаточный газ и излучение. Были проведены измерения этого паразитного фона без включенного микроконтакта, что позволило вычислить чистый тепловой поток через микроконтакт. Используя описанную экспериментальную методику, можно простым способом и с малой погрешностью ( $<1,0\%$ ) измерять тепловой поток через диэлектрический микроконтакт.

Позже была разработана экспериментальная техника для получения контактов высокой стабильности, которая включала получение контактов металл–диэлектрик [10]. В низкотемпературных экспериментах ( $T_1 \approx 0,1 - 10$  К) точечные контакты изготавливали на основе монокристалла кремния высокой чистоты, укрепленного на трех тонких микроиглах, одна из которых была изготовлена из меди, а две других из полимерной смолы марки «VespeI». Теплопровод-

ность смолы «VespeI» очень мала, она не давала заметного вклада в тепловой поток, также как и радиация. Непосредственно перед формированием контакта медная игла была заточена электролитически, чтобы избежать появления слоя окисла. Плоская поверхность кремния была отполирована с помощью алмазной пасты. Средняя шероховатость поверхности составляла 0,7 мкм до полировки и около 2 нм после полировки. Кристалл кремния с приклеенным к нему датчиком температуры был нагрет до 10 К. После нагревания кристалл остывал за счет теплового потока через точечный контакт, образованный поверхностью кремния и медной иглой. Для вычисления теплового потока измеряли временную зависимость температуры кремния с использованием величины теплоемкости кремния.

### 1.3. Измерение теплопроводности контактов адиабатическим методом

Эксперименты с контактами NaCl–NaCl в интервале температур 4,2–65 К [8,9] продемонстрировали, что в контактах с эффективными диаметрами 150–350 нм баллистический режим теплопроводности сохраняется при повышении температуры «горячего берега» контакта  $T_1$  вплоть до 60 К.

Эксперимент по теплопроводности высокостабильных точечных контактов Si–Cu [10] (см. рис. 2) выявил хорошо определенный пик на температурной зависимости редуцированного теплового потока при  $T_1 = 0,5$  К. Этот максимум связан с дифракционными эффектами при прохождении фонона через точечный контакт. При  $T_1 > 2$  К транспорт фононов осуществляется в пределе геометрической оптики, серия пиков демонстрирует поликонтактность. Согласно модели сферического растекания, для этого

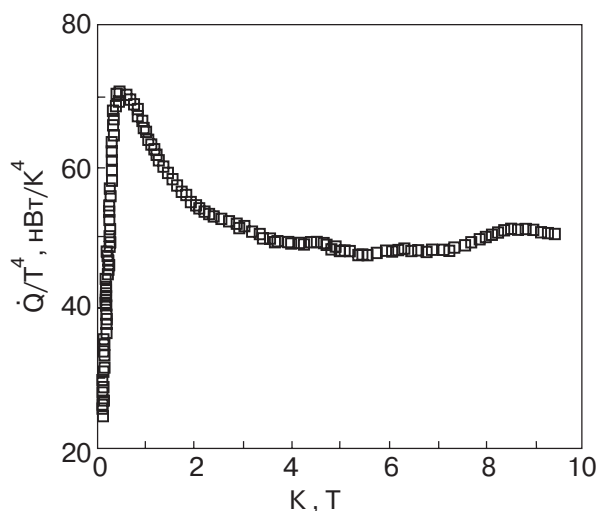


Рис. 2. Редуцированный тепловой поток, измеренный в точечном контакте Si–Cu [10].

типа контактов значение диаметра составляет 30 нм и длина контактов  $L = 4,5$ .

Температурная зависимость теплового потока в точечных контактах Si–Cu в интервале температур 4,2–25 К в работе [36] была исследована с помощью описанного в разд. 1.2 адиабатического метода (см. рис. 3).

В этих контактах для фононов реализовался режим геометрической оптики. В этом случае тепловой поток пропорционален  $T_1^4$ . Оценки, основанные на режиме геометрической оптики, дали для величины эффективного диаметра контакта  $d_{\text{eff}} = 5000$  нм [36]. Заметим, что в поликонтактной геометрии эффективный диаметр связан со средним диаметром  $d$  отдельного контакта соотношением  $d_{\text{eff}} = d\sqrt{n}$  ( $n$  – число отдельных контактов в поликонтакте).

Адиабатическим методом исследован также тепловой поток в контактах KBr–KBr и KBr–Cu [38]. Кристаллы KBr были приготовлены методом Чохральского в Институте Монокристаллов НАН Украины. Чистота образцов составляла 99,99%. Температурные зависимости потока тепла через контакты KBr–KBr и KBr–Cu весьма схожи. Они показывают наличие режима геометрической оптики для фононов в широком интервале температур. Редуцированный поток тепла обнаруживает низкотемпературный максимум при  $T_1 = (5,7 \pm 0,2)$  К. Аналогичную аномалию наблюдал Кестлер с соавторами [39]. Возможное происхождение такой аномалии в результате резонансного транспорта через слой слабо-связанных примесей обсуждалось в работах [38,40]. Эта аномалия хорошо воспроизводится и имеет подобный вид в контактах KBr–KBr и KBr–Cu. Наконец, наблюдалась сильная температурная зависи-

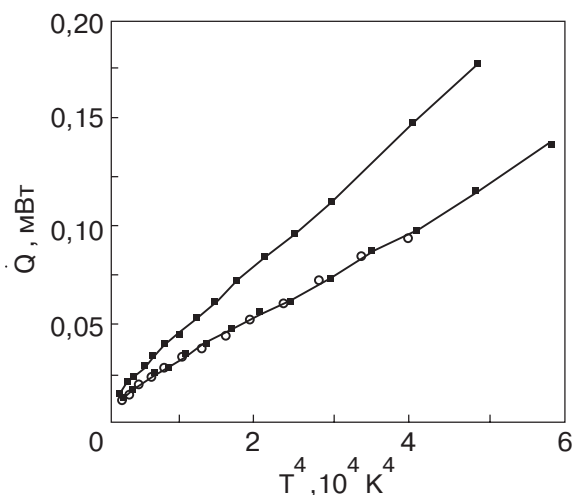


Рис. 3. Температурная зависимость теплового потока через точечные контакты Si–Cu в интервале температур 4,2–25 К [36].



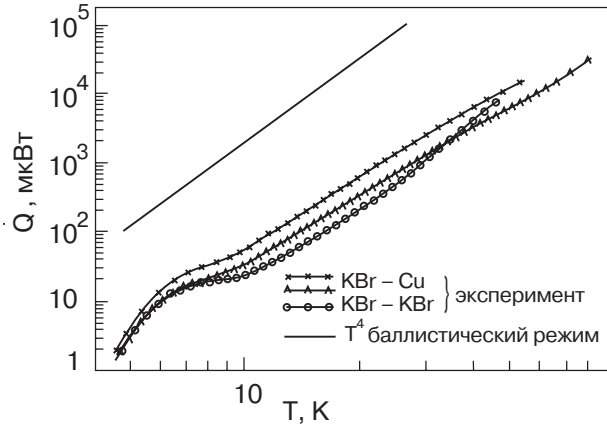


Рис. 4. Температурная зависимость теплового потока через точечные контакты KBr-Cu, KBr-KBr [36].

мость редуцированного теплового потока в интервале 5–10 К. Этот эффект обусловлен интенсивным рассеянием низкочастотных фононов в статистическом поле протяженных деформаций решетки, связанных с приготовлением точечных контактов методом «игла-наковальня». Верхняя температурная граница интенсивного рассеяния фононов (10 К) позволяет оценить характерный размер протяженных деформаций как 5 нм.

## 2. Фононный транспорт в 3D-наноконтактах

### 2.1. Неравновесные состояния фононной системы в контакте

Теоретическое описание сильнонеравновесных наносистем потребовало развития специальных методов решения задач физической кинетики, что позволило выйти далеко за рамки термодинамики неравновесных процессов. Теория баллистического фононного транспорта тепла в точечных контактах впервые была развита в [12]. В этом разделе излагаются основы теории фононного транспорта в точечных контактах.

Условие баллистического прохождения фононов через диэлектрический микроконтакт подразумевает, что размер (диаметр) контакта  $d$  мал по сравнению с длиной неупругого рассеяния фононов в массивном образце  $l_{ph}$ . Как правило, в области низких температур, малых по сравнению с температурой Дебая  $\Theta_D$ , для реализации баллистического транспорта фононов достаточно, чтобы размер контакта не превышал  $10^4$  нм. Из-за малости неупругого фонон-фононного взаимодействия ( $d \ll l_{ph-ph}$ ) в контакте не может установиться средняя температура.

В качестве базовой теоретической модели контакта, соединяющего массивные берега, используется отверстие в непроницаемом (как для электронов, так и для фононов) экране. Если не оговаривается

противное, размер контакта предполагается большим по сравнению с длинами волн электронов  $\lambda_e$  и фононов  $\lambda_{ph}$  ( $\lambda_e, \lambda_{ph} \ll d$ ).

Состояние фононной системы диэлектрического точечного контакта можно описать с помощью кинетического уравнения для функции распределения фононов  $N$  и граничных условий, учитывающих различие температур в массивных берегах:

$$N(z \rightarrow \pm\infty) = n_p(\omega, T_{1,2}). \quad (2)$$

Здесь  $z$  — ось контакта, нормальная к плоскости контакта, температура левого массивного берега ( $z \rightarrow -\infty$ ) принимается равной  $T_1$ , а правого берега ( $z \rightarrow \infty$ ) равной  $T_2$ ,  $n_p$  — распределение Планка.

Перенос тепла в баллистическом микроконтакте осуществляется двумя невзаимодействующими группами фононов, функции распределения которых задаются температурами массивных берегов контакта  $T_1$  и  $T_2$ . Поэтому кинетическое уравнение для  $N$  можно решать методом характеристик, в нулевом приближении по интегралу фононного рассеяния.

### 2.2. Поток фононов в приближении геометрической оптики

Баллистический фононный поток тепла  $\dot{Q}_B(T_1, T_2)$  через микроконтакт содержит вклады противоположного знака, соответствующие двум группам фононов, приходящим из разных берегов контакта [12]:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_B(T_1, T_2) = & \frac{\hbar S_0}{2(2\pi)^3} \times \\ & \times \sum_{\alpha} \int d\mathbf{k} \omega^{\alpha}(\mathbf{k}) u_z^{\alpha} D_{1,2}^{\alpha} \{N(\omega^{\alpha}, T_1) - N(\omega^{\alpha}, T_2)\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $S_0$  — площадь контакта,  $\omega(\mathbf{k})$  — закон дисперсии фононов,  $\mathbf{u}^{\alpha} = \partial\omega^{\alpha}(\mathbf{k}) / \partial\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор фонона,  $\alpha$  — индекс ветви фононного спектра. Если функции распределения фононов в массивных берегах равновесные, то нужно считать  $N = n_p(\omega, T) = [\exp(\hbar\omega/T) - 1]^{-1}$ . В выражение (3) входит коэффициент передачи энергии фонона  $D_{1,2}^{\alpha}(\mathbf{k})$  из берега 1 в берег 2, при этом закон дисперсии учитывается для берега 1. Величина потока тепла не изменится, если в формуле (3) использовать соответствующие величины для берега 2. Это является следствием теоремы взаимности для прохождения упругих волн через идеальную границу раздела [41].

Теорема взаимности утверждает, что доля потока энергии фононов, связанных с упругой модой  $j$  в береге 1, переносимая фононами моды  $l$  в береге 2 ( $l, j \rightarrow 2, 1$ ), совпадает с аналогичной долей для обратного процесса ( $2, l \rightarrow 1, j$ ). Величина  $D_{1,2}^{\alpha}(\mathbf{k})$  определяется законом преломления фононов с учетом

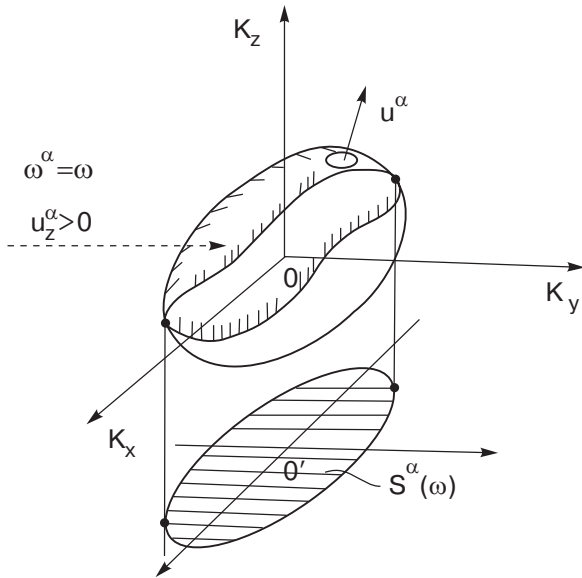


Рис. 5. Область интегрирования по изоэнергетической поверхности в  $k$ -пространстве и геометрическое представление функции  $S$ .

конверсии ветвей фононного спектра на границе контакта. Для баллистического плоского контакта коэффициенты  $D_{mn}^\alpha$  определяются свойствами кристаллических решеток берегов и могут быть вычислены при рассмотрении задачи о переходе плоской волны через бесконечную плоскую границу двух сред [42,43]. В низкочастотной области, где можно использовать модель акустического рассогласования [42],  $D_{mn}^\alpha$  слабо зависит от частоты. В случае контакта одинаковых сред в баллистическом режиме геометрической оптики следует положить  $D = 1$ . В этом случае величина баллистического теплового потока зависит от особенностей закона дисперсии фононов и не зависит от механизмов рассеяния фононов в массивном кристалле. Связь теплового потока с видом фононного спектра можно представить в явном виде, выразив  $\dot{Q}_B(T_1, T_2)$  как

$$\dot{Q}_B(T_1, T_2) = \frac{\hbar S_0}{(2\pi)^3} \int d\omega \omega S(\omega) \{N(\omega, T_1) - N(\omega, T_2)\}. \quad (4)$$

Функция  $S(\omega)$  определяется интегралом по поверхностям постоянной энергии  $\omega^\alpha(\mathbf{k}) = \omega$  в  $k$ -пространстве волновых векторов фононов:

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \sum_{\alpha} \int_{u_z^\alpha > 0} d\mathbf{k} u_z^\alpha(\mathbf{k}) \delta(\omega^\alpha(\mathbf{k}) - \omega) = \\ &= \sum_{\alpha} \int_{u_z^\alpha > 0} d\sigma_\omega^\alpha n_z(\sigma_\omega^\alpha), \end{aligned} \quad (5)$$

$\sigma_\omega^\alpha$  и  $\mathbf{n}(\sigma)$  обозначают элемент изоэнергетической поверхности и единичный вектор нормали к ней.

Из выражения (5) следует, что величина  $S(\omega) = \sum_{\alpha} S^\alpha(\omega)$  имеет простое геометрическое представление в  $k$ -пространстве: для каждой  $\alpha$ -ветви фононного спектра  $S^\alpha(\omega)$  есть площадь проекции на плоскость контакта той части изоэнергетической поверхности  $\omega^\alpha(\mathbf{k}) = \omega$ , для которой выполнено условие  $u_z^\alpha(\mathbf{k}) > 0$  (рис. 5).

### 2.3. Низкотемпературный баллистический транспорт фононов

В области низких частот, когда закон дисперсии фононов можно представить в линейном приближении  $\omega_\alpha = u^\alpha(\mathbf{k}/k)\mathbf{k}$ , величина  $S(\omega)$  квадратична по частоте  $S(\omega) = P\omega^2$ , где

$$P = \sum_{\alpha} \int_{u_z^\alpha > 0} d\Omega u_z^\alpha(\Omega) [\mathbf{u}^\alpha(\Omega)\mathbf{e}(\Omega)]^{-3}. \quad (6)$$

Здесь  $\Omega$  означает совокупность угловых координат единичного вектора  $\mathbf{e} = \mathbf{k}/k$ . В изотропном случае величина  $S(\omega)$  принимает наиболее компактный вид:  $S_{is}(\omega) = \pi \sum_{\alpha} k_{\alpha}^2(\omega)$ .

Проанализируем выражение (4). При низких температурах ( $T_{1,2} \ll \hbar\omega_D$ ) возбуждены только низкочастотные колебания и для величины теплового потока получим [12]:

$$\dot{Q}_B(T_1, T_2) = \frac{\pi S_0}{120 \hbar^3} P(T_1^4 - T_2^4). \quad (7)$$

Для простейшего случая однородного контакта в приближении изотропного закона дисперсии имеем

$$P = \pi \sum_{\alpha} (u^\alpha)^{-2}. \quad (8)$$

Эту оценку обычно используют при вычислении эффективной площади баллистических контактов [9].

При постановке экспериментов по изучению фононного транспорта в точечных контактах часто рассматривается ситуация, когда  $T_1 \gg T_2$ . В этих случаях можно положить  $T_2 \simeq 0$ , а температуру «горячего» берега контакта  $T_1$  обозначать как  $T$ . Температурная зависимость потока тепла, пропорциональная  $T^4$ , служит критерием реализации баллистического режима геометрической оптики в микроструктуре. Приведенная выше температурная зависимость фононного потока тепла аналогична полученной Литтлом [42] и Халатниковым [44,45] для фононного теплообмена двух сред. Температурный скачок может реализоваться на границе двух сред, если вклад граничного рассеяния фононов в теплосоппротивление больше, чем теплосоппротивление массивных берегов. Такой эффект впервые наблю-

дался в экспериментах Капицы по теплообмену между сверхтекучим гелием и металлом [46]. Как показывает проведенный выше анализ транспорта тепла через точечный контакт, присутствие в контакте границы раздела двух сред вовсе не обязательно для формирования контактного скачка температуры. Можно сказать, что этот скачок возникает за счет рассеяния фононов на поверхности вакуумного зазора, окружающего точечный контакт.

Заметим, что при высоких температурах ( $T_{1,2} \gg \hbar\omega_D$ ) величина потока линейно зависит от разности температур  $\Delta T = T_1 - T_2$ . При малых  $\Delta T$  можно ввести величину теплосопrotivления  $R_T$ , определяемую из формулы  $\dot{Q} = \Delta T/R_T$  во всем интервале температур. Выражение для  $R_T$  представляет аналог формулы Шарвина [47] для баллистического сопротивления металлического точечного контакта.

#### 2.4. Восстановление колебательного спектра по температурной зависимости баллистического теплового потока

Рассматривая величину  $\dot{Q}_B(T,0)$  в достаточно широком интервале температур, можно указать формальную процедуру, обратную преобразованию (5). Используя результаты, приведенные в [48], необходимое интегральное преобразование можно представить в виде [12]

$$S(\omega) = \frac{4\pi^2}{S_0} \left(\frac{\hbar}{\omega}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \left[ \Gamma\left(\frac{3}{2} + i\mu\right) \zeta\left(\frac{3}{2} + i\mu\right) \right]^{-1} \times \int_0^{\infty} dT \dot{Q}_B(T,0) T^{-5/2} \left(\frac{\hbar\omega}{T}\right)^{i\mu}. \quad (9)$$

Здесь  $\Gamma(x)$  — гамма-функция;  $\zeta(x)$  — дзета-функция Римана. С математической точки зрения такие преобразования являются некорректными, т.е. небольшие погрешности в определении  $\dot{Q}_B(T,0)$  могут привести к сильным искажениям искомой функции  $S(\omega)$ . Отметим, что аналогичная в математическом отношении задача обращения для определения плотности состояния по температурной зависимости теплоемкости рассмотрена в работе И.М. Лифшица [49].

### 3. Рассеяние фононов в приконтактной области

Температурная зависимость экспериментально наблюдаемого фононного теплового потока через границу между твердыми телами демонстрирует отклонения от температурной зависимости, которую предсказывает теория акустического рассогласования Литтла [42]. Это возникает в результате физических процессов, протекающих на контактной по-

верхности и в приповерхностных слоях [17] (см. рис. 6).

При анализе процессов рассеяния фононов в микроконтакте удобно использовать следующее определение редуцированного теплового потока:

$$\dot{q}_B(T_1, T_2) = \dot{Q}_B(T_1, T_2) / (T_1^4 - T_2^4). \quad (10)$$

Рассчитанный в приближении геометрической оптики низкотемпературный редуцированный тепловой поток (10) не зависит от температуры.

Однако при измерении теплопроводности диэлектрических микроконтактов с размерами порядка 100 нм наблюдается низкотемпературное ( $5 \text{ K} < T < 10 \text{ K}$ ) уменьшение редуцированной теплопроводности с ростом температуры [36]. В указанном интервале температурная зависимость теплопроводности контакта может быть представлена как  $\dot{q}_B(T_1, T_2) = \text{const } T_1^{-\varepsilon}$ , где  $\varepsilon \approx 1$ . Такая зависимость свидетельствует об эффективном рассеянии фононов в контакте.

#### 3.1. Упругое рассеяние фононов в контакте

Проявление низкотемпературного фононного рассеяния впервые обнаружено при исследовании металлических микроконтактов. Хотя микроконтактные спектры металлов демонстрируют хорошее соответствие с функциями электрон-фононного взаимодействия и плотностью состояний фононов, найденными для объемных образцов [4], ряд теоретических [50–53] и экспериментальных [54,55] исследований показал, что состояние приконтактной области может сильно влиять на кинетику фононов. Эффекты, связанные с «реабсорбцией» неравновесных фононов [50–53], свидетельствуют о возможно-

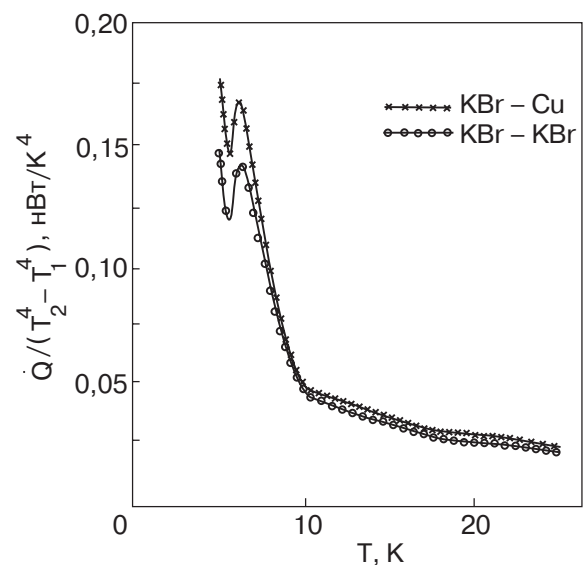


Рис. 6. Температурная зависимость редуцированного теплового потока в микроконтактах KBr–Cu, KBr–KBr [36].



сти существенного упругого рассеяния фононов в приконтактной области, вызванного искажениями кристаллической решетки при образовании контакта.

Рассеянию фононов в массивных кристаллах посвящена обширная литература (см., например, [16,56]). Однако для точечных контактов необходимо рассмотреть пространственно неоднородный случай и учесть возможность рассеяния фононов в приконтактной области на протяженных деформациях решетки. В работе [9] предложено статистическое описание распространения акустических фононов в поле протяженных деформаций решетки в предположении, что характерные размеры искажений велики по сравнению с длиной волны фонона.

Представим распространение фонона как последовательность некоррелированных упругих рассеяний на малые углы, при которых остается неизменным модуль фазовой скорости  $\mathbf{u}$ . Рассмотрим функцию неравновесного распределения  $N_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  для фононов с квазиимпульсом  $\mathbf{q}$  в точке  $\mathbf{r}$  (здесь опущены индексы ветвей фононного спектра). Дифференциальное уравнение Фоккера–Планка [57,58], соответствующее случайному блужданию в пространстве ориентаций квазиимпульсов, имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{\mathbf{q}} + \mathbf{u} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} N_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\tau_i} \Delta_{\Omega} N_{\mathbf{q}}, \quad (11)$$

где  $\tau_i$  — время релаксации по ориентациям квазиимпульса (и фазовой скорости),  $\Delta_{\Omega}$  — угловая часть оператора Лапласа в пространстве угловых переменных  $\Omega$  квазиимпульса  $\mathbf{q}(\Omega)$ .

Учитывая, что уравнение (11) соответствует сохранению модуля вектора  $\mathbf{q}$ , в случае линейного закона дисперсии можно заменить время  $t$  геометрическим параметром — длиной вдоль «траектории» фонона  $s = ut$ . Введем обозначение  $l_i = u\tau_i$  для характерной длины релаксации ориентации квазиимпульса. Интегрируя уравнение (11) по пространственным переменным, получаем уравнение, описывающее только диффузию в пространстве угловых переменных  $\Omega$  для вектора квазиимпульса  $\mathbf{q}$ . Функция Грина для последнего уравнения хорошо известна из теории вращательного броуновского движения [57,58].

Величина длины релаксации ориентации направления квазиимпульса фонона  $l_i$  при многократном рассеянии может быть оценена по характеристикам неоднородностей среды, в которой распространяются фононы. Если считать неоднородности крупномасштабными (в масштабе характерной длины волны тепловых фононов  $\lambda \sim a\Theta_D/T$ ,  $a$  — постоянная решетки), их можно описать, рассматривая вариацию локальных значений скорости звука  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ .

Удобно ввести безразмерную флуктуирующую величину

$$\theta(\mathbf{r}) = [u^2(\mathbf{r}) - \langle u^2(\mathbf{r}) \rangle] / \langle u^2(\mathbf{r}) \rangle. \quad (12)$$

При этом метод геометрической оптики [57] приводит к среднеквадратичному значению для отклонения луча, прошедшего путь  $s$  в неоднородной среде:

$$\langle q^2(s) \rangle = \left( \frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \frac{\sigma_{\theta}^2 s^3}{6R_{\theta}}. \quad (13)$$

Здесь  $\sigma_{\theta}^2$  и  $R_{\theta}$  — нормированная дисперсия и радиус корреляции для случайного поля  $\theta(r)$ , которое считается гауссовым. С другой стороны, аналогичную величину можно вычислить и в модели диффузии в пространстве угловых переменных. При  $s \ll l_i$  найдем

$$\langle q^2(s) \rangle = \frac{2s^3}{3l_i}. \quad (14)$$

Сравнивая выражения (14) и (15), получаем оценку

$$l_i \sim R_{\theta} / \sigma_{\theta}^2. \quad (15)$$

Выражение для длины рассеяния (15) содержит низкочастотные статистические характеристики упругой среды. Оценка (15) приводит к выводу, что коэффициент прохождения  $D$  для акустических фононов слабо зависит от частоты  $\omega$  до тех пор, пока рассеивающие неоднородности можно считать крупномасштабными ( $\lambda \ll R_{\theta}$ ).

Иная ситуация возникает, когда характерный размер рассеивающих неоднородностей  $\delta$  мал по сравнению с  $\lambda$ . В этом случае следует рассматривать рассеяние фононов на точечных дефектах. Оценка, найденная в приближении рэлеевского рассеяния фононов (см., например, [56]), дает:

$$l_i(\omega) \sim \frac{nu}{n_d \omega D} \left( \frac{\omega D}{\omega} \right)^4. \quad (16)$$

Здесь  $n$  — число элементарных ячеек в единице объема,  $n_d$  — концентрация рассеивающих дефектов. Резкое увеличение длины рассеяния  $l_i$  при уменьшении частоты должно привести к существенному росту редуцированного микроструктурного потока тепла при уменьшении температуры.

Переход от режима рэлеевского рассеяния фононов к режиму геометрической оптики детально изучался для кристаллов NaCl, содержащих включения коллоидного серебра [59,60], а также допированных кристаллов KBr и KCl [61]. Модельные расчеты, выполненные для рассеивателей в виде сфер [62,63], вытянутых сфероидов [64] и цилиндриче-

ских неоднородностей [65], показали, что в области перехода от рэлеевского рассеяния к режиму геометрической оптики сечение рассеяния фононов немонотонно по частоте. В области  $kb \simeq 1,5$ , где  $b$  — поперечный размер рассеивателя, сечение рассеяния имеет максимум, сопровождающийся серией затухающих осцилляций.

Модель, включающая рассмотрение гетероконтактов, учитывает, что длины рассеяния фононов в различных берегах контакта могут различаться ( $l_1$  и  $l_2$  соответственно). Рассматривая баланс переноса энергии фононов через сечение контакта в предположении упругого рассеяния фононов, можно найти поправочный коэффициент  $K$  для подынтегрального выражения в формуле (17) для потока тепла, описывающий переход к диффузионному режиму рассеяния фононов ( $l_i \ll d$ ).

В случае упругого рассеяния фононов, когда энергия фононной системы не передается из одного частотного интервала в другой, уравнение непрерывности потока энергии можно записать для каждой фононной частоты  $\omega$ . Сразу предположим, что упругое рассеяние является достаточно сильным, чтобы в обоих берегах гетероконтакта установился диффузионный режим. Как показывают вычисления [36], при этом в выражении для потока энергии в фононной системе появляется дополнительный коэффициент  $K$ , соответствующий упругому рассеянию фононов на примесях в обоих берегах контакта:

$$\dot{Q}_B(T_1, T_2) = \frac{\hbar S_0}{2(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{k} \omega^{\alpha}(\mathbf{k}) u_z^{\alpha} D_{12}^{\alpha} K^{\alpha} \times \\ \times \{N(\omega^{\alpha}, T_1) - N(\omega^{\alpha}, T_2)\}, \quad (17)$$

$$K^{\alpha}(l_1^{\alpha}, l_2^{\alpha}) = \frac{32}{3\pi d} \left( \frac{1}{l_1^{\alpha}} + \frac{1}{l_2^{\alpha}} \right)^{-1}. \quad (18)$$

Эффективный коэффициент рассеяния фононов на неоднородностях  $K$  принимает вид  $K = (16/3\pi)(l/d)$ , а эффективная длина рассеяния  $l$  дается выражением  $1/l = (1/2l_1) + (1/2l_2)$ . Можно получить наибольшее значение параметра  $l$ , соответствующее баллистическому режиму, из условия  $K = 1$ , а именно  $l_{\text{ball}} = 3\pi d/16$ .

В гетероконтактах коэффициент передачи энергии фонона определяется свойствами контактирующих кристаллических решеток и устройством межкристаллической границы [66–72]. В работе Литтла [42] коэффициент  $D$  был рассчитан для длинноволновых акустических фононов на основе модели акустического рассогласования в рамках теории упругости. (Там же была предложена феноменологическая модель «диффузного рассогласования» для

случая прохождения фононов через шероховатую границу контакта.) Наиболее просто оценки для  $D$  выглядят для продольных колебаний, когда  $D$  определяется отношением импедансов  $Z_1/Z_2$  (отношение произведений плотностей  $\rho_{12}$  и скоростей звука  $u_{12}$  контактирующих твердых тел). В этой модели коэффициенты  $D$  не зависят от частоты, причем для решетки с большей скоростью звука (например,  $u_1$ )  $D_{12} \cong \min[(\rho_1 u_1/\rho_2 u_2), (\rho_2 u_2/\rho_1 u_1)]$ , для решетки с меньшей скоростью звука  $D_{21} \cong D_{12}(u_2/u_1)^2$ . В работе [43] коэффициенты  $D$  вычислены для контактов модельных ГЦК решеток с одинаковыми периодами, но различными силовыми матрицами. Показано, что при частотах, соизмеримых с дебаевскими, коэффициенты  $D$  начинают сильно зависеть от частоты, обращаясь в нуль по достижении наименьшей из дебаевских частот.

Отклонения от режима геометрической оптики для транспорта фононов хорошо заметны при использовании редуцированной величины теплового потока (10). Первый тип отклонений заключается в монотонном уменьшении редуцированного потока тепла при температурах  $T > 10$  К. Это свидетельствует о значительном увеличении рассеяния фононов в области контакта с ростом температуры. Температурная зависимость длины рассеяния фононов  $l$  может быть выражена степенным законом  $l(T) \cong T^{-s}$ , где, согласно экспериментальным данным,  $0,5 < s < 0,7$ . Такая слабая температурная зависимость типична для рассеяния фононов на статических напряжениях кристаллической решетки вблизи дислокаций [72]. Учитывая, что все рассматриваемые контакты были получены методом «иглы и наковальни», возникновение полей напряжений в области контакта закономерно.

### 3.2. Фонон-фононное рассеяние в точечных контактах

При достаточно низких температурах ( $T \leq \Theta_D/10$ ) процессы фонон-фононного рассеяния существенны только для «больших» баллистических микроконтактов ( $d \geq 10^2$  нм) [9,73]. Если в приконтактной области происходит упругое рассеяние фононов (с характерной длиной рассеяния  $l_r \leq d$ ), то вклад фонон-фононного рассеяния становится более существенным, так как в этом случае характерная длина неупругого рассеяния фононов оценивается как  $l_{\text{in}} = (l_r l_{\text{ph-ph}})^{1/2}$ .

Вклад фонон-фононного рассеяния в тепловой поток в диэлектрическом баллистическом точечном контакте можно учесть, вводя в правую часть кинетического уравнения для фононной системы (11) интеграл фонон-фононного взаимодействия  $I_{\text{ph-ph}}$ . Считая, что характерная длина фонон-фононного

рассеяния велика по сравнению с размерами контакта ( $l_{\text{ph-ph}} \gg d$ ), рассмотрим интеграл фонон-фононного взаимодействия, в котором учтены трех-фононные взаимодействия [56].

Переносимый фононами поток тепла  $\dot{Q}$ , вычисленный в первом приближении по  $I_{\text{ph-ph}}$ , можно представить, вводя микроконтактную длину рассеяния  $l_{\text{ph-ph}}^c$  согласно формуле

$$\dot{Q} = \dot{Q}_B^{(0)} + \dot{Q}_{\text{ph-ph}}^{(1)} = \dot{Q}_B^{(0)} [1 - (d/l_{\text{ph-ph}}^c)]. \quad (19)$$

В соответствии с этим, добавку  $\dot{Q}_{\text{ph-ph}}^{(1)}$  можно разделить на вклад рассеяния с перебросом ( $U$ -процессы)  $\dot{Q}_U^{(1)}$  и вклад нормального рассеяния ( $N$ -процессы)  $\dot{Q}_N^{(1)}$ . При этом получим значения длин рассеяния для  $N$ - и  $U$ -процессов:

$$l_N^c = -d(\dot{Q}_B^{(0)}/\dot{Q}_N^{(1)}); \quad l_U^c = -d(\dot{Q}_B^{(0)}/\dot{Q}_U^{(1)}). \quad (20)$$

Учтем, что при таком определении справедливо соотношение  $l_{\text{ph-ph}}^{-1} = l_N^{-1} + l_U^{-1}$ .

Распространение фононов с учетом геометрических ограничений, вызванных присутствием микроконтакта, приводит к дополнительным правилам отбора [73] для  $N$ -процессов рассеяния, совместимых с законами сохранения квазиимпульса и энергии фононов [74,75]. Так, вклады процессов рассеяния обращаются в нуль для параллельных векторов групповой скорости фононов. Максимальный вклад достигается при противоположно направленных скоростях. Поэтому в микроконтактный поток фононов пренебрежимо малый вклад дает процесс распада с участием длинноволновых фононов  $t'' \rightarrow t + t'$ . (Здесь и далее  $t$  и  $l$  – обозначения поперечной и продольной ветвей фононного спектра,  $t_1$  и  $t_2$  – поперечные фононы разных ветвей.) Нормальные процессы типа  $l \rightarrow t + t'$ ,  $l \rightarrow l' + t$  или  $t_1 \rightarrow t_2 + l$  дают вклад в  $\dot{Q}_{\text{ph-ph}}^{(1)}$ , так как в них один из векторов скорости может быть направлен противоположно двум другим.

Если разность температур на берегах контакта невелика ( $T_1 - T_2 = \Delta T \ll T_1$ ,  $T_1 \cong T$ ), то значения  $l_N^c$  и  $l_U^c$  можно приписать определенной температуре контакта  $T$ . Поправку  $\dot{Q}_N^{(1)}$ , обусловленную нормальными процессами, можно оценить, считая фононы, участвующие в рассеянии, длинноволновыми, так что для всех фононных частот выполняется условие  $\hbar\omega < T$ ,  $n_{\text{ph}}(\omega, T) \cong T/\hbar\omega > 1$ . Константу фонон-фононного взаимодействия оценим как  $V(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q}'') \sim (a^3 u/\hbar^2 M) qq' q''$  [56], где  $M$  – масса иона. После двойного суммирования по квазиимпульсам фононов получаем

$$\dot{Q}_N^{(1)} \sim - (d^3 a^3 / \hbar^7 M) (T/u)^8 \Delta T. \quad (21)$$

Поскольку при  $\Delta T \ll T \ll \Theta_D$  справедлива оценка  $\dot{Q}_B^{(0)} \cong (d^2/\hbar^3 u^2) T^3 \Delta T$ , по определению (20) находим

$$l_N^c \sim a(Mu^2/\Theta_D)(\Theta_D/T)^5. \quad (22)$$

Заметим, что эта оценка совпадает с результатом для массивного образца.

При учете  $U$ -процессов следует положить  $|\mathbf{q} - \mathbf{q}'| \sim G \sim \hbar/a$ , тогда и для результирующего квазиимпульса справедливо  $q'' \sim G$  ( $G$  – вектор обратной решетки). Входящие в интеграл фонон-фононных столкновений планковские функции распределения приводят к появлению множителя  $\exp(-c\Theta_D/T)$ , где  $c \sim 1$ , в поправке на неупругое рассеяние фононов [73]. Фазовый объем, в котором выполняется закон сохранения энергии фононов, оценим, как это сделано в работе [76]. Это приводит к следующей оценке для вклада  $U$ -процессов в неупругую добавку к фононному потоку тепла:

$$\dot{Q}_U^{(1)} \sim - \gamma d^3 a^{-5} (\hbar/M) (\Theta_D/T)^{1/2} \exp(-c\Theta_D/T) \Delta T. \quad (23)$$

Безразмерный коэффициент  $\gamma \sim 1$  зависит от степени отклонения закона дисперсии коротковолновых фононов от линейного, однако ход температурной зависимости имеет общий вид, связанный с возможностью описания указанных отклонений в квадратичном приближении. С учетом низкотемпературной оценки для  $\dot{Q}_B$  определение (20) в этом случае дает

$$l_U^c \sim \gamma^{-1} a(Mu^2/\Theta_D)(T/\Theta_D)^{7/2} \exp(c\Theta_D/T), \quad T \ll \Theta_D. \quad (24)$$

Благодаря экспоненциальному множителю  $l_U^c$  оказывается убывающей функцией температуры в интервале  $0 < T \leq \Theta_D/3$ . Заметим, что температурные зависимости  $l_N^c$  и  $l_U^c$  рассматриваются в интервале температур, где  $\dot{Q}_B$  пропорционально  $T^3 \Delta T$ . Как показывает простой модельный расчет, указанное условие соблюдается при  $T \leq \Theta_D/10$ . В области температур  $T \leq \Theta_D/30$  выполняется условие  $l_N^c < l_U^c$ . Характерные длины фонон-фононного рассеяния при этом оказываются порядка размеров «больших» точечных контактов ( $d \geq 10^2$  нм). При этом основной вклад в рассеяние дают  $N$ -процессы. Следует заметить, что при указанных параметрах точечных контактов в них не формируется дрейфовое распределение фононов. Длины рассеяния быстро убывают с ростом температуры, и при  $T \sim \Theta_D/3$  фонон-фононное рассеяние, как показывает ряд экспериментов [9,36], может дать заметный вклад в фононный тепловой поток в микроконтакте.

Эффективная интерполяционная процедура [73] позволяет рассчитать плотность фононного теплового потока в точечном контакте в широком интервале температур по известной температурной зависимости длины рассеяния фононов. На рис. 7 приведены результаты расчетов плотности фононного теплового потока (при небольших перепадах температур) для серии контактов различного размера ( $10 \text{ нм} \leq d \leq 10^3 \text{ нм}$ ). (Использованы данные о длине рассеяния фононов в кристаллическом кварце [77].) Видно, что для малых контактов ( $d = 10 \text{ нм}$ ) фононное рассеяние дает вклад только при достаточно высоких температурах ( $T \sim 100 \text{ К}$ ). В области  $T < 10 \text{ К}$  для всех рассмотренных контактов устанавливается баллистический режим транспорта фононов.

### 3.3. Фононный транспорт в микроконтактах металл-диэлектрик

В экспериментах по изучению фононного транспорта в точечных контактах часто оказывается удобным использовать контакт металл-диэлектрик [10, 36, 38]. Проанализируем перенос тепла в микроконтактах металл-диэлектрик при различных режимах фононного и электронного транспорта.

В микроконтактах металл-диэлектрик электронная система дает малый вклад в процесс теплопереноса до тех пор, пока размер микроконтакта  $d$  оста-

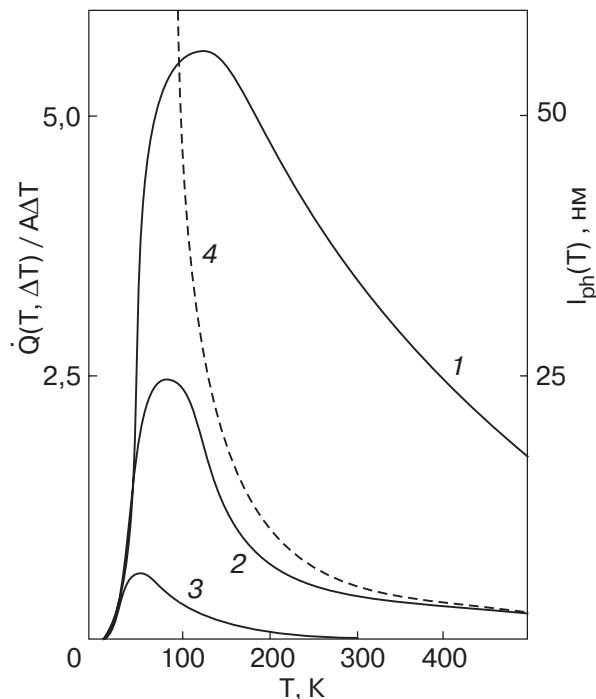


Рис. 7. Приведенная теплопроводность микроконтакта в  $\tau$ -приближении при различных  $d$ , нм [53]: 10(1), 100(2), 1000(3);  $l_{\text{ph}}$  (4) — длина рассеяния фононов в кристаллическом кварце.

ется малым по сравнению с эффективной длиной фонон-электронного рассеяния  $l_a$ . В случае баллистического переноса фононов  $l_a$  совпадает с длиной фонон-электронного рассеяния  $l_{\text{ph-e}}$  в чистом металле. В случае сильного упругого рассеяния  $l_a$  зависит от длины релаксации фононов по квазиимпульсу  $l_r$ ,  $l_a = (l_{\text{ph-e}} l_r)^{1/2}$ . Как показано в предыдущем разделе, эффекты фонон-фононного рассеяния при  $T \sim 10 \text{ К}$  становятся существенными только для «больших» точечных контактов ( $d > 100 \text{ нм}$ ). Использование металлической «иглы» позволяет получать стабильные контакты металл-диэлектрик с размерами 10–100 нм. В таких контактах при  $0 < T < 10 \text{ К}$  вклад фонон-фононного рассеяния пренебрежимо мал.

В микроконтакте металл-диэлектрик перенос тепла через границу контакта осуществляется фононами, которые могут рассеиваться и поглощаться электронной системой. Будем обозначать как  $T_d$  и  $T_m$  температуры диэлектрического и металлического берегов контакта. Заметим, что  $T_m$  в нашей задаче означает температуру фононной и электронной систем массивного металла, так как малый поток тепла через микроконтакт не может нарушить равенство температур этих систем.

Передача энергии фононов через границу контакта за счет взаимодействия электронов с поверхностными колебаниями проанализирована в ряде работ [44, 45, 78–82]. Интенсивность этого взаимодействия определяется параметром  $\lambda_s / l_{\text{ph-e}}$ , где  $\lambda_s$  — глубина проникновения поверхностных волн. Этот параметр для большинства металлов мал и, как правило, слабо зависит от температуры,  $\lambda_s / l_{\text{ph-e}} \simeq \Theta_D / \varepsilon_F$  ( $\varepsilon_F$  — энергия Ферми металла). Рассматриваемый механизм теплопередачи существен для контактов с сильным акустическим рассогласованием [80].

Для контактов с хорошим акустическим согласованием становится важным вклад в теплопередачу электрон-фононного взаимодействия в объеме металла. Этот вклад следует учитывать как возмущение по малому параметру  $d / l_{\text{ph-e}}$ , если  $d \ll l_{\text{ph-e}}$  и  $l_{\text{ph-e}}$  меньше остальных длин рассеяния фононов. Заметим, что для контактов, имеющих диаметр  $d \simeq 100 \text{ нм}$ , при  $T > 1 \text{ К}$  обычно выполняется условие  $d > \lambda_s$ .

Для описания электрон-фононной системы металлического берега микроконтакта используем кинетическое уравнение. Состояние фононной системы будем описывать функцией распределения  $N_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{q}$  — квазиимпульс фонона (как и в уравнении (11), здесь опущен индекс фононной ветви). Состояние электронной системы металлического берега описывается функцией  $f$ . Поскольку теп-



лообмен через точечный контакт слабый, функцию  $f$  можно считать равновесным распределением Ферми, соответствующим температуре металлического берега  $T_m$ . Для фононной системы металлического берега кинетическое уравнение имеет вид

$$\mathbf{u}(\mathbf{q})(\partial/\partial\mathbf{r})N_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = I_{\text{ph-e}}\{N_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}), f\} + I_{\text{ph-i}}\{N_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})\}. \quad (25)$$

Здесь  $I_{\text{ph-e}}$  — интеграл фонон-электронного взаимодействия,  $I_{\text{ph-i}}$  — интеграл упругого рассеяния фононов на искажениях кристаллической решетки. В баллистическом пределе будем полагать  $I_{\text{ph-i}} = 0$ . В диэлектрическом берегу уравнение для функции  $N_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  не содержит  $I_{\text{ph-e}}$ , кроме того, другой вид могут иметь закон дисперсии и интеграл  $I_{\text{ph-i}}$ .

Уравнение для электронной системы металлического берега можно не выписывать, так как она слабо возмущена электрон-фононным взаимодействием в окрестности микроконтакта. Будем считать в дальнейшем отражение электронов от поверхности металла зеркальным, пренебрегая взаимодействием электронов с поверхностными фононами. Следствием слабого возмущения электронной системы является избыточный потенциал на поверхности металлического берега, рассчитанный в [82].

Граничные условия на бесконечности обеспечивают равновесный вид распределений для фононов и электронов на массивных берегах контакта. На поверхности плоского вакуумного зазора, образующего контакт, предполагается непротекание электронов и фононов.

Поверхность раздела металл-диэлектрик является дополнительным рассеивателем для фононов. Можно ввести граничное условие на поверхности, разделяющей металл и диэлектрик, считая, что фонон, распространяющийся в металле от границы контакта, может с вероятностью  $D_{dm}^{\alpha}$  быть переданным через поверхность раздела или с вероятностью  $1 - D_{dm}^{\alpha}$  быть отраженным от этой поверхности [82]. Коэффициент  $D_{dm}^{\alpha}(q)$  определяется свойствами кристаллических решеток берегов контакта и может быть вычислен при рассмотрении задачи прохождения плоской упругой волны через границу раздела двух сред как отношение квадратов модулей амплитуд волн, преломленной и падающей на границу раздела (см. разд. 2.3). В общем случае распространяющаяся в берегу  $d$  фононная мода с индексом  $\alpha$  может быть возбуждена тремя различными модами в берегу  $m$ . Мы должны рассматривать коэффициент  $D_{dm}^{\alpha}(\mathbf{q})$  как среднюю величину по указанным модам.

**3.3.1. Баллистический режим теплопереноса в контакте металл-диэлектрик.** В микроконтакте

размером  $d$  баллистический транспорт фононов в пределе геометрической оптики реализуется при выполнении условия

$$\lambda_{\text{ph}} \ll d \ll l_{\text{ph-ph}}, l_{\text{ph-e}}, l_r. \quad (26)$$

При выполнении этого условия фононный поток тепла  $\dot{Q}(T_d, T_m)$  через микроконтакт между массивными берегами, имеющими температуры  $T_d$  и  $T_m$ , осуществляется двумя не взаимодействующими группами фононов, при этом в окрестности микроконтакта нельзя определять единую температуру фононной системы. Установление общей температуры фононной системы не происходит также в случае упругого рассеяния фононов в области контакта, при этом может выполняться условие  $d \gg l_r$ .

В баллистическом пределе, когда можно положить  $I_{\text{ph-e}} = 0$ ,  $I_{\text{ph-i}} = 0$ , решение кинетического уравнения для фононов (25) с учетом прохождения и отражения фононов в металлическом берегу имеет следующий вид:

$$N_{\mathbf{q}}^{(0)\alpha}(\mathbf{r}) = \beta(\mathbf{u}^{\alpha}(\mathbf{q}, \mathbf{r}))D_{dm}^{\alpha}(\mathbf{q})N_p(\omega^{\alpha}(\mathbf{q})/T_d) + [1 - \beta(\mathbf{u}^{\alpha}(\mathbf{q}, \mathbf{r}))D_{dm}^{\alpha}(\mathbf{q})]N_p(\omega^{\alpha}(\mathbf{q})/T_m). \quad (27)$$

Здесь  $N_p(x) = [\exp(\hbar x) - 1]^{-1}$ . Функция  $\beta(\mathbf{u}(\mathbf{q}, \mathbf{r}))$  принимает значение 1 во всех точках  $r$  металла, в которые может прийти фонон с групповой скоростью  $\mathbf{u}$  со стороны контакта, иначе говоря,  $\beta(\mathbf{u}(\mathbf{q}, \mathbf{r})) = 1$  в пределах телесного угла, под которым видно отверстие контакта. В остальных случаях  $\beta = 0$ .

Используя фононную функцию распределения (27), легко записать выражение для баллистического потока тепла  $\dot{Q}_B(T_d, T_m)$ , переносимого фононами из диэлектрического в металлический берег микроконтакта. Это выражение имеет вид уравнения (3), в котором положено  $T_1 = T_d$ ,  $T_2 = T_m$  и  $D_{12}^{\alpha}(\mathbf{q})$  заменено на  $D_{dm}^{\alpha}(\mathbf{q})$ . Заметим, что в случае контакта металл-диэлектрик в формуле (3) удобно рассматривать закон дисперсии фононов для металлического берега контакта.

**3.3.2. Фонон-электронное рассеяние в баллистическом режиме.** Электронная теплопроводность баллистического точечного контакта металл-металл может быть представлена как [83]:

$$\dot{Q}_{EL}(T_1, T_2) = \frac{m_e}{12} \frac{S_0}{\hbar^3} \varepsilon_F (T_1^2 - T_2^2). \quad (28)$$

Сравнивая это выражение с выражением для фононного потока тепла при низких температурах

$$\dot{Q}_B(T_1, T_2) = \frac{\pi^2}{40} \frac{S_0}{\hbar^3} \bar{D}(T_1^4 - T_2^4)(\bar{u})^{-2}, \quad (29)$$



получаем отношение

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{EL}(T_1, T_2) / \dot{Q}_B(T_1, T_2) = \\ = \frac{10m_e (\bar{u})^2}{3\pi^2 \bar{D}} \varepsilon_F (T_1^2 + T_2^2)^{-1} \gg 1, \end{aligned} \quad (30)$$

$\bar{D}$  и  $\bar{u}$  — средние по ветвям фононного спектра низкочастотные значения коэффициента передачи энергии и скорости акустических фононов. Последнее неравенство соответствует большей низкотемпературной теплопроводности электронной системы.

В контакте металл–диэлектрик электроны не пересекают границу контакта. Поэтому наличие металлического берега с высокой теплопроводностью мало влияет на величину потока тепла. Учет фонон-электронного рассеяния в металлическом берегу контакта можно провести в виде теории возмущений по малому параметру  $d/l_{ph-e}$ . Формальное применение формулы для оценки вклада фонон-электронного рассеяния в фононный тепловой поток дает величину порядка

$$\dot{Q}_B \frac{d}{l_{ph-e}} \sim \dot{Q}_B \frac{dT}{a\varepsilon_F}. \quad (31)$$

Однако решение кинетического уравнения (25) показывает, что вклад рассеяния фононов на баллистических электронах в первом порядке по  $d/l_{ph-e}$  обращается в нуль.

Действительно, интеграл фонон-электронных столкновений можно записать, используя баллистическую функцию распределения фононов (индекс ветви опускаем):

$$\begin{aligned} I_{ph-e}(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = \tau_{ph-e}^{-1}(\mathbf{q}) D_{dm} \times \\ \times [N_p(\omega/T_m) - N_p(\omega/T_d)] \beta(\mathbf{u}(\mathbf{q}), \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь  $\tau_{ph-e}^{-1}(\mathbf{q}) = 2(m/\hbar)^2 W(\mathbf{q})[\omega(\mathbf{q})/q]$ ,  $W$  — квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия,  $m$  — масса электрона (имеется в виду квадратичный закон дисперсии). Заметим, что благодаря множителю  $\beta(\mathbf{u}(\mathbf{q}), \mathbf{r})$  интеграл столкновений отличен от нуля лишь в тех точках, куда из диэлектрика приходят инжектированные фононы.

Поправка первого порядка  $N^{(1)}$  к баллистической функции распределения имеет вид интеграла от  $I_{ph-e}(\mathbf{q}, \mathbf{r})$  вдоль траектории баллистических фононов. Удобно сразу вычислить интеграл по сечению контакта:

$$\int_{z=0} ds \mathbf{u}(\mathbf{q}) N^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = \int_{r_z > 0} dr^3 \beta(-\mathbf{u}(\mathbf{q}), \mathbf{r}) I_{ph-e}(\mathbf{q}, \mathbf{r}). \quad (33)$$

Заметим, что поток тепла вычисляется на сечении контакта в предположении, что упруго отра-

жающиеся от границы электроны не вносят вклад в теплопроводность. С учетом возможного отражения фононов на границе, найдем добавку  $\dot{Q}^{(1)}$  к тепловому потоку:

$$\begin{aligned} \dot{Q}^{(1)} = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \sum_{\alpha} \int dq^3 \omega^{\alpha}(\mathbf{q}) (D_{dm}^{\alpha})^2 \times \\ \times [N_p(\omega^{\alpha}, T_d) - N_p(\omega^{\alpha}, T_m)] \times \\ \times \tau_{ph-e}^{-1}(\mathbf{q}) \int_{z=0} dr^3 \beta(-\mathbf{u}^{\alpha}(\mathbf{q}), \mathbf{r}) \beta(\mathbf{u}^{\alpha}(\mathbf{q}), \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (34)$$

Эта поправка к тепловому потоку обращается в нуль, так как

$$\beta(-\mathbf{u}(\mathbf{q}), \mathbf{r}) \beta(\mathbf{u}(\mathbf{q}), \mathbf{r}) = 0. \quad (35)$$

Действительно, если в баллистическом режиме одно из направлений скорости  $\mathbf{u}$  соответствует фонону, пришедшему от границы контакта (когда  $\beta = 1$ ), то по противоположному направлению  $-\mathbf{u}$  фонон приходит из массивного берега и  $\beta(-\mathbf{u}(\mathbf{q}), \mathbf{r}) = 0$ .

Заметим, что отсутствие электронного вклада в теплопроводность в первом порядке по  $l_{ph-e}$  связано именно с баллистическим режимом транспорта фононов в микроконтакте. В случае диффузионного переноса фононов в металле, обусловленном малостью длины упругого рассеяния фононов  $d \gg l_r$  в выражении (34) нужно учитывать изотропные части функции  $\beta(\mathbf{u}(\mathbf{q}), \mathbf{r})$ , т.е.  $\beta_0(\mathbf{r})$ . В диффузионном режиме  $1 - \beta_0(\mathbf{r}) \sim (d/r)$ . При этом получаем расходимость в пространственном интеграле, входящем в выражение для  $\dot{Q}^{(1)}$ , что означает необходимость решить задачу в нелинейном по  $l_{ph-e}$  варианте.

Осталось оценить вклад в тепловой поток, возникающий за счет неупругого рассеяния электронов на границе металл–диэлектрик. На поверхности металла возможно существование дополнительных ветвей спектра элементарных возбуждений, таких как поверхностные фононы, плазмоны, экситоны. Детальный расчет влияния поверхностных состояний на состояние электронной системы можно найти в работах [84–86]. Результаты работ [85,86] приводят к выводу, что для транспортных эффектов относительный вклад взаимодействия электронов с поверхностными фононами в микроконтакте мал по параметру  $\lambda_s/d$  по сравнению с вкладом объемных фононов. При этом поток тепла, возникающий за счет неупругого рассеяния электронов от границы точечного контакта металл–диэлектрик, можно при  $T_d > 1$  К и  $T_d \gg T_m$  оценить как

$$\dot{Q}_{surf} \sim \frac{S_0}{\hbar^3 \Theta_D} m_e T_d^4. \quad (36)$$

При указанных выше условиях относительный вклад неупругого рассеяния на границе имеет вид

$$\dot{Q}_{\text{surf}}/\dot{Q}_B \sim \frac{m_e(\bar{u})^2}{D\Theta_D} \sim \frac{\Theta_D}{D\varepsilon_F}. \quad (37)$$

Если температура  $T_d$  диэлектрического берега контакта с размерами  $d \sim 10$  нм понижается ( $1\text{ К} > T_d \gg T_m$ ), может реализоваться случай  $\lambda_s > d$ . Неупругое рассеяние электронов на границе металла определяется тогда величиной параметра  $d/l_{\text{ph-e}}$ , вычисленном при эффективной температуре  $T_d$ . Вклад неупругого рассеяния на границе в тепловой поток в этом режиме быстро убывает с уменьшением температуры:

$$\dot{Q}_{\text{surf}} \sim \frac{S_0 d}{\hbar^3 \Theta_D^3 \varepsilon_F a} m_e T_d^7. \quad (38)$$

Заметим, что при  $1\text{ К} > T_d \gg T_m$  в контактах с размерами  $d \sim 10$  нм становятся существенными эффекты дифракции фононов при прохождении отверстия контакта.

**3.3.3. Диффузионный режим переноса фононов в контакте металл-диэлектрик.** В случае диффузионного режима переноса фононов в контакте металл-диэлектрик вклад электронной системы в теплопроводность может быть существенным.

Как отмечено в разд. 3.3, при упругом рассеянии фононов, когда энергия фононной системы не передается из одного частотного интервала в другой, уравнение непрерывности потока энергии можно записать для каждой фононной частоты  $\omega$ . Если упругое рассеяние достаточно сильное и в берегах «1» и «2» гетероконтакта установился диффузионный режим, то функции распределения фононов  $N_{\mathbf{q},1,2}(\mathbf{r})$  определяются своими изотропными частями  $\bar{N}_{1,2}(\omega, \mathbf{r})$ . При изотропном законе дисперсии фононов, изотропном времени импульсной релаксации фононов  $\tau_{\text{ph-i}}$  и отсутствии источников тепла уравнение непрерывности для потока энергии в фононной системе каждого берега имеет вид  $\text{div grad } \bar{N}_{1,2}(\omega, \mathbf{r}) = 0$ . Граничное условие на поверхности, соединяющей различные берега, можно построить, рассматривая баланс переноса энергии фононов через границу на расстояниях, малых по сравнению с длинами упругого рассеяния ( $l_{1,2} \ll d$ ). В случае непрерывности  $\bar{N}_{1,2}(\omega, \mathbf{r})$ , рассчитав поток энергии, получим результат, описываемый формулой (17). Ниже будем считать, что индекс «1» или  $d$  соответствует диэлектрическому берегу, а индекс «2» или  $m$  — металлическому.

При отклонении от баллистического режима условие (35) нарушается и вклад фонон-электронного взаимодействия уже не обращается в нуль. Однако

при этом следует учитывать многократное фонон-электронное рассеяние. Это удобно сделать с помощью метода, который применялся для описания «реабсорбции» фононов в микрoконтактах [53,87,88].

В диффузионном режиме функцию распределения для фононов  $N_{\mathbf{q},m}(\mathbf{r})$  можно искать в виде суммы симметричной  $S$  и антисимметричной  $\mathbf{M}u$  частей по направлениям вектора групповой скорости  $u$ . Уравнения для  $S(\omega, \mathbf{r})$  и  $\mathbf{M}(\omega, \mathbf{r})$  можно получить из кинетического уравнения для фононов (25), используя  $I_{\text{ph-e}}$  и  $I_{\text{ph-i}}$  в  $\tau$ -приближении. Эти уравнения имеют наиболее простой вид, если предположить, что закон дисперсии фононов линейный и изотропный:

$$u^2 \text{div } \mathbf{M} = 3\tau_{\text{ph-e}}^{-1} [N_P(\omega, T_m) - S(\omega, \mathbf{r})], \quad (39)$$

$$\text{grad } S = -\tau_{\text{ph-i}}^{-1} \mathbf{M}. \quad (40)$$

Если из уравнения (40) исключить  $\mathbf{M}$ , станет видно, что распространение фононов в металле сопровождается затуханием:

$$\Delta S = -l_{\text{tr}}^{-2} [N_P(\omega, T_m) - S(\omega, \mathbf{r})], \quad (41)$$

$$l_{\text{tr}} = (l_{\text{ph-e}} l_{\text{ph-i}} / 3)^{1/2}. \quad (42)$$

Здесь  $l_{\text{ph-i}} = u\tau_{\text{ph-i}}$  — характерная длина импульсной релаксации фононов.

Сильное фонон-электронное рассеяние приводит к тому, что неравновесная часть функции распределения фононов в металле затухает как  $\exp(-r/l_{\text{tr}})$  при удалении от сечения контакта ( $r \gg d$ ). Характерная длина затухания  $l_{\text{tr}}$  близка к  $l_a$ . Длина  $l_{\text{tr}}$  имеет ясный геометрический смысл: если  $d \gg l_{\text{tr}}$ , то у поверхности металлического берега возникает область шириной  $l_{\text{tr}}$ , в пределах которой затухают инжектированные фононы. В этой области происходит передача потока тепла от фононной системы к электронной.

Поток энергии фононов на границе контакта можно вычислить, пользуясь условием непрерывности. В результате получим выражение, аналогичное найденному в диффузионном режиме для контакта диэлектрик-диэлектрик. Однако в рассматриваемом здесь случае диффузионный коэффициент  $K$  зависит от длины затухания:

$$K^{-1} = \frac{3\pi}{32} \left( \frac{D_d^i d}{l_d^i} + \frac{D_m^i d}{l_m^i} \exp(-d/\pi l_{\text{tr}}) \right). \quad (43)$$

Видно, что при  $l_{\text{tr}} \ll d$  вклад в сопротивление металлического берега становится пренебрежимо малым. Однако нас интересует более реальный случай

слабого объемного затухания фононов, когда  $l_r = l_{ph-i} < d < l_{tr}$ . При этом

$$l_\alpha = 3^{-1/2} l_{in} = 3^{-1/2} l_{ph-e} l_{ph-d}^{1/2} (l_{ph-d} + l_{ph-e})^{-1/2}. \quad (44)$$

Если считать, что благодаря высокому импедансу металла выполняется условие  $(\bar{D}_d/l_d) \ll \ll (\bar{D}_m/l_m)$ , то, рассматривая случай  $T_d \gg T_m \simeq 0$ , получаем простое выражение

$$\dot{Q}(T_d, 0) = \dot{Q}^{(0)}(T_d, 0) [1 + d \langle 1/l_\alpha \rangle_{T_d}] = \dot{Q}^{(0)} + \dot{Q}^{(1)}. \quad (45)$$

Обозначение  $\langle 1/l_\alpha \rangle_{T_d}$  введено для среднего значения величины  $1/l_\alpha(\omega)$  при температуре  $T_d$ , соответствующей инжектированным фононам. Если учесть, что в металле  $l_r$  имеет слабую частотную зависимость и в диффузионном режиме  $l_r \ll l_{ph-e}$ , получаем:

$$\langle 1/l_\alpha \rangle_{T_d} \simeq \langle 1/(l_r l_{ph-e})^{-1/2} \rangle_{T_d}. \quad (46)$$

Величина, описываемая формулой (46), зависит от температуры инжектированных из диэлектрика фононов как  $T_d^{1/2}$ . Таким образом, температурная зависимость величины теплового потока  $\dot{Q}$  в диффузионном режиме незначительно отклоняется от закона  $T^4$ : лишь малая добавка к потоку фононов  $\dot{Q}^{(1)}(T_d, 0)$  зависит от температуры «горячего» диэлектрика как  $T_d^{4.5}$ . Температурная зависимость  $T^5$ , предсказанная в [78], может реализоваться лишь в случае сильного фонон-электронного рассеяния в контакте, когда  $l_r \gg l_{ph-e}$  и  $l_{in} \simeq l_{ph-e}$ .

#### 4. Квантовый транспорт фононов в 3D-контактах

##### 4.1. Дифракция упругих волн на отверстии точечного 3D-контакта

До сих пор мы описывали расчет баллистического транспорта фононов в предположении, что характерная длина волны фононов мала по сравнению с  $d$  (приближение геометрической оптики). Температурная зависимость  $\dot{Q}_B(T, 0) \sim T^4$  может служить критерием реализации баллистического транспорта фононов в режиме геометрической оптики.

Низкотемпературные эксперименты [10, 14, 36] показывают, что температурная зависимость  $\dot{Q}_B$ , как правило, имеет более сложный вид,  $\dot{Q}_B(T, 0) \sim f(T) T^4$ , где функция  $f(T)$  имеет резко выраженный максимум при  $T \sim 1$  К (рис. 2). Естественно предположить, что низкотемпературные аномалии возникают в результате нарушения условия геометрической оптики  $d \gg \lambda$ . Действительно, учитывая, что при температуре  $T$  характерную длину

волны фононов можно оценить как  $\lambda \simeq a \Theta_D / T$ , (где  $a$  — постоянная решетки), удается легко получить значение температуры  $T_{dif}$ , при которой выполняется условие  $d \sim \lambda$ :  $T_{dif} \sim \Theta_D a / d$ . Для  $d \sim 100$  нм получим  $T_{dif} \sim 1$  К. При этой и более низких температурах нельзя рассматривать транспорт фононов в пределе геометрической оптики: становятся существенными эффекты дифракции упругих волн на отверстии контакта.

Рассмотрим плоский контакт, соединяющий два одинаковых диэлектрических кристалла. При условии  $kd \leq 1$  коэффициент передачи энергии плоской упругой волны через контакт определяется дифракционными эффектами и может быть отличен от единицы [10, 14].

При расчете потока энергии, переносимого через точечный контакт, колебания решетки рассматриваются как ансамбль бозонов с энергией  $\hbar\omega(\mathbf{k})$ , а дифракция на отверстии делает существенными волновые свойства бозонов. Таким образом, вычисление теплового потока приводит к квантовой задаче о характеристиках квазичастицы в пространстве с геометрическими ограничениями. Как показано ниже, квантовый транспорт тепла описывается выражением, аналогичным формуле Ландауэра для электронной проводимости [89, 90]. Как и в случае квантового прохождения электронов через точечный контакт, в рассматриваемом нами случае задача сводится к решению стационарного волнового уравнения для свободной частицы. Однако граничные условия на поверхности контакта, налагаемые на решение волнового уравнения в задаче о квантовом транспорте фононов, существенно отличаются от стандартных нулевых граничных условий (условий Дирихле). Чтобы получить это граничное условие, нужно рассмотреть задачу о прохождении упругой волны через контакт в приближении сплошной среды.

При падении плоской волны с волновым вектором  $\mathbf{k}$  на отверстие контакта (опустим на время индекс ветви фононного спектра) возникает поток энергии упругой волны. Усредненную по периоду монохроматического колебания плотность потока обозначим как  $\mathbf{W}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ . Полный поток энергии, проходящий через контакт, равен  $P(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{S}_0 \mathbf{W}(\mathbf{r}(\mathbf{S}_0), \mathbf{k})$ , где  $d\mathbf{S}_0$  — элемент поверхности выбранного сечения контакта. Удобно проинтегрировать  $P(\mathbf{k})$  по угловым координатам  $\Omega(\mathbf{k})$  волнового вектора при условии  $u_z(\mathbf{k}) > 0$ .

Если дифракционными эффектами можно пренебречь, то упругая волна на сечении контакта остается плоской и справедливо равенство

$$\int_{s_z(\mathbf{k}) > 0} d\Omega(\mathbf{k}) \int d\mathbf{S}_0 \mathbf{W}_0(\mathbf{k}) = \pi S_0 W_0(k) \quad (47)$$

(ограничимся линейным законом дисперсии упругих волн  $\omega = uk$ ,  $\mathbf{W}_0(\mathbf{k})$  — плотность потока энергии в плоской волне).

Отношение потоков энергии с учетом дифракции и без него представляет коэффициент передачи энергии  $\bar{D}(\mathbf{k})$ :

$$\bar{D}(\mathbf{k}) = \int_{u_z(\mathbf{k}) > 0} d\Omega(\mathbf{k}) \int d\mathbf{S}_0 \mathbf{W}_0(\mathbf{r}, \mathbf{k}) [\pi S_0 W_0(k)]^{-1}. \quad (48)$$

Теперь поток тепла через контакт можно записать в виде

$$\dot{Q} = \hbar S_0 (8\pi^2)^{-1} \int dk k^2 u(k) \omega(k) \bar{D}(k) \times \\ \times [n_P(\omega, T_1) - n_P(\omega, T_2)]. \quad (49)$$

Поскольку речь идет о потоке тепла, переносимом длинноволновыми фононами, будем вычислять энергетические потоки, входящие в (48), в приближении сплошной упругой среды. Рассмотрим гармонические колебания вектора смещения среды  $\mathbf{U}$  (с частотой  $\omega$ ). Вектор плотности потока энергии упругой волны, как известно [91], имеет вид

$$\mathbf{W} = -\sigma \mathbf{U}, \quad (50)$$

где тензор напряжений  $\sigma_{ij}$  выражается через тензор модулей упругости и тензор деформации, т.е. через первые производные от смещения. В простейшем случае изотропной среды, когда тензор модулей упругости определяется скоростями поперечной  $u_l$  и продольной  $u_t$  волн, ограничимся рассмотрением нормального падения волн на контакт. При этом не происходит конверсии ветвей и задачу дифракции можно решать для каждой ветви в отдельности (будем опускать индексы  $t$  и  $l$ ). Усредненный по периоду колебаний поток энергии на сечении контакта  $P(k)$  можно записать в виде

$$P(\mathbf{k}) = -(\rho u^2 \omega / 2) \int d\mathbf{S}_0 \text{Im} [U^*(\mathbf{r}) \nabla U(\mathbf{r})]. \quad (51)$$

Здесь  $U(\mathbf{r})$  — скалярная функция, входящая в выражение для амплитуды вектора смещения

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}_k U(\mathbf{r}) \exp(i\omega t), \quad (52)$$

$\rho$  — плотность кристалла. Теперь выражение для коэффициента переноса энергии  $\bar{D}(k)$  принимает вид

$$\bar{D}(k) = -(\pi S_0 k)^{-1} \int d\Omega(\mathbf{k}) \int d\mathbf{S}_0 \text{Im} (U^* \nabla U). \quad (53)$$

Величина  $U$  удовлетворяет волновому уравнению, которое в стационарной форме имеет вид

$$-\Delta U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = k^2 U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (54)$$

$k = \omega/u$ , индекс  $k$  означает, что рассматривается решение волнового уравнения, соответствующее падающей из полупространства плоской волне с волновым вектором  $\mathbf{k}$ .

Граничное условие, налагаемое на решение волнового уравнения, предполагает, что  $\mathbf{u}$  есть суперпозиция плоской волны, приходящей к экрану  $\Sigma_1$  и отраженной от этого экрана, а также сферических волн, распространяющихся от входного и выходного отверстий контакта. Существенно условие отражения волны от свободных поверхностей, образующих контакт ( $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$ , см. рис. 1). При упругом отражении условие на поверхности кристалла, не испытывающей внешнего давления, имеет вид

$$\sigma_{ij} n_j = 0. \quad (55)$$

( $n$  — нормаль к поверхности кристалла). Такое условие допускает ненулевые значения смещения на поверхности контакта. Сильное затухание волн у поверхности контакта можно описать, требуя обращения в нуль смещения  $U$  на поверхности (условие Дирихле).

Рассмотрим вначале случай упругого отражения волн от границы твердого тела. При нормальном падении волн на контакт условие (55) для продольной и поперечной ветвей принимает вид условия Неймана:

$$\mathbf{n} \text{ grad } U = 0. \quad (56)$$

При построении решения волнового уравнения в такой геометрии можно использовать аналогию с задачей о волновой функции электрона, проходящего через контакт. Трехмерный вариант этой задачи был рассмотрен в работе [92], где использована модель «сферического растекания» в берегах контакта и циклические гармонические условия для решения волнового уравнения на поверхности контакта, имеющего осевую симметрию.

Можно представить решение волнового уравнения в виде суммы нормальных мод, соответствующих налагаемым граничным условиям. В этом случае коэффициент передачи энергии  $\bar{D}$  имеет вид суммы по нормальным модам с индексом  $n$  (каждая мода  $(2n+1)$ -кратно вырождена благодаря азимутальной симметрии задачи):

$$\bar{D}(kd) = 4(kd)^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) T_n(kd). \quad (57)$$

#### 4.2. Квантовая фононная теплопроводность контакта

Приведенная выше схема вычисления коэффициента передачи энергии относится к низкочастотным акустическим колебаниям решетки. Вычисление



полного фононного потока требует учета квантовой статистики фононов. При этом выражение для потока тепла через контакт принимает вид

$$\dot{Q}(T_1, T_2) = (\hbar/2\pi) \sum_{\alpha} \int d\omega \omega \Phi^{\alpha}(\omega) \times [n_P(\omega, T_1) - n_P(\omega, T_2)], \quad (58)$$

где  $\Phi^{\alpha}(\omega)$  — сумма по нормальным колебаниям

$$\Phi^{\alpha}(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) T_n(\omega d/u^{\alpha}).$$

Формулы типа (58) обладают большой общностью и многолетней предысторией. Наборы резонансных мод, присущих волноводам переменного сечения, традиционно изучаются методами акустики, детально разработанными к середине XX века [93]. Дифракционные эффекты, возникающие при вхождении упругой волны в открытый конец волновода (например, «запирание рупора»), хорошо известны в акустике. Однако вынужденные колебания, обычно возбуждаемые в акустических волноводах при передаче информации, далеки от излучения равновесного фононного термостата. Баланс переноса тепла между термостатами, разделенными рассеивающей фононы границей, впервые рассмотрен Литтлом [42] в связи с расчетом скачка Капицы [46]. В качестве механизма рассеяния Литтл рассмотрел акустическое рассогласование контактирующих непрерывных сред. Следующий шаг в учете фононного рассеяния был сделан в работах [94–96], в которых исследовано распространение колебаний в дискретных гармонических упругих цепочках, содержащих конечное число рассеивающих примесей (см. также [97]). Модель, использованная в этих работах, соответствует теплообмену между сильно анизотропными средами, разделенными слоем, содержащим примеси. В такой системе рассеяние можно учесть в достаточно общем виде, введя набор коэффициентов  $T_n(\omega)$ , соответствующих различным нормальным колебаниям системы «цепочка с примесями». Как и в модели Литтла, в цепочечной модели нет эффекта баллистического растекания фононов в приконтактной области. Поэтому обе модели соответствуют случаю малых перепадов температуры. Общее выражение для теплового потока в цепочечной модели может быть получено из уравнения (58) при разложении по малому параметру  $(T_1 - T_2)/(T_1 + T_2)$ . Полученное в [14] выражение (58) соответствует другому механизму рассеяния — дифракции фононов на апертуре точечного контакта, соединяющего трехмерные резервуары фононов, имеющих разные температуры. За счет эффекта растекания фононов в такой системе реализуется

«гигантский скачок Капицы», равный  $(T_1 - T_2)$ . Заметим также, что структура выражения (58) аналогична выражению для квантованного электрического тока в точечных контактах [98,99].

При исследовании транспорта фононов в контакте термостат, поставляющий в контактную область равновесные термализованные фононы, является не самым удобным источником фононов. В принципе, при подобных исследованиях можно применять источники фононов с неравновесным квазимонохроматическим распределением [100,101]. В предельном случае, когда поток тепла  $\dot{Q}$  переносится монохроматическими фононами с распределением  $N(\omega) = n\delta(\omega - \omega_0)$ , получаем выражение, аналогичное формуле Ландауэра [89,90] для электронной проводимости:

$$\dot{Q} = n(\hbar\omega_0/2\pi) \sum_{\alpha} \sum_{\mu, \nu} T_{\mu, \nu}^{\alpha}(\omega_0). \quad (59)$$

Здесь индексы  $\mu$  и  $\nu$  — номера поперечных мод колебаний в контакте с коэффициентами прохождения  $T_{\mu, \nu}^{\alpha}$ .

Учет дифракционных эффектов при фононном транспорте в точечных контактах приводит, по-видимому, к более сложной картине, чем при транспорте электронов. Причина в более сложных граничных условиях для упругих волн на поверхности контакта. Для реальных контактов эти условия могут не сводиться к рассмотренным здесь задачам Неймана и Дирихле. (Дискуссию о выборе граничных условий в квантово-механических задачах можно найти в [102].)

Удобная для расчетов форма коэффициента переноса энергии получается, если использовать для геометрии контакта модель «сферического растекания» [92], которую можно получить, сворачивая первоначально плоскую поверхность экрана в трубку и склеивая берега контакта по поверхности сферы. При падении волны вдоль оси  $z$  решение волнового уравнения симметрично относительно этой оси, и на поверхности контакта, свернутой в трубку исчезающе малого диаметра, вследствие цилиндрической симметрии выполняется условие Неймана.

Коэффициенты прохождения  $T_n$  для  $(2n+1)$ -кратно вырожденных мод в модели растекания для плоского «шарвиновского» контакта имеют вид

$$T_n^{-1}(kd) = 1 + S_n^2(kd), \quad (60)$$

$$S_n(kd) = 2 \sum_{m=0}^n \frac{(2n-m)!(2n-2m)!}{m![(n-m)!]^2} \times (n-m+1)(kd)^{2m-2n-1}. \quad (61)$$



Функция  $T_n(x)$  при  $n > 0$  имеет вид размытых ступеней, причем  $T_n(x) \ll 1$  в области  $x < 2\sqrt{n(n+1)}$ , при  $x \gg 2\sqrt{n(n+1)}$   $T_n(x) \cong 1$ . Таким образом,  $k_n = 2\sqrt{n(n+1)}/d$  — характерное значение волнового вектора, при котором нормальная мода с номером  $n > 0$  начинает проходить через контакт.

Обратим внимание на то, что коэффициент прохождения для нулевой моды имеет вид

$$T_0(kd) = (kd)^2 / [4 + (kd)^2]. \quad (62)$$

Согласно (62),  $\bar{D}(0) = 1$ , т.е. длинноволновые фононы ( $l \gg kd$ ) почти не отражаются от отверстия контакта. Это связано с выбором условия Неймана при решении задачи дифракции. Эффект практически полного прохождения волны через апертуру при условии упругого отражения волны от экрана хорошо известен [103,104]. Например, при нормальном падении волны на круглое отверстие в плоском экране вариационный принцип, примененный к задаче Неймана, приводит к следующему выражению для коэффициента передачи энергии волны [103]:

$$D = 8\pi^{-2} - \left[ (2/3\pi)^2 + \frac{8}{\pi^4} \right] k^2 d^2. \quad (63)$$

Следует заметить, что рассчитанная согласно уравнению (63) величина  $\bar{D}(kd)$  практически не отличается от единицы во всем интервале значений параметра  $kd$ .

При условии  $kd \gg 1$  транспорт фононов можно рассматривать в приближении геометрической оптики, причем становится несущественным ступенчатый характер функции частоты  $\Phi(\omega)$ , и она может быть представлена в виде

$$\Phi_{\text{geom}}(\omega) = \frac{S_0}{4\pi} \left( \frac{\omega}{u} \right)^2. \quad (64)$$

(Заметим, что в использованной здесь модели сферического растекания площадь контакта  $S_0$  надо считать равной  $\pi d^2$ .)

Дифракция скалярной волны на идеально поглощающем экране ( $U = 0$  на экране) относится, по выражению автора работы [105], к «архетипическим» задачам волновой механики. Хотя решение этой задачи в замкнутой форме до сих пор не найдено, для случая нормального падения волны на экран известно представление решения в виде ряда [106,107], а также вариационным методом рассчитан коэффициент передачи энергии  $D(kd)$  [105–108]. По сравнению с задачей Неймана существенное отличие результатов возникает в области  $kd < 5$ .

Случай предельно больших длин волн ( $kd \ll 1$ ) соответствует рэлеевскому излучению падающей волны через отверстие контакта. При этом для плоского контакта [108]

$$\bar{D}_{\text{Rayl}} = (9\pi)^{-2} (kd)^4. \quad (65)$$

При  $kd > 5$  величина  $D(kd)$  после незначительных затухающих осцилляций быстро приближается к значению 1 (предел геометрической оптики).

#### 4.3. Модель «растекания» для квантовой теплопроводности контактов в виде канала

Определение коэффициента передачи энергии при квантовом транспорте фононов приводит нас к вычислениям, аналогичным нахождению отраженных и проходящих волн в каналах в упругой среде. Распространение акустических колебаний в длинных каналах изучено достаточно полно (см., например, [104]). Последовательный учет краевых эффектов приводит к тем же трудностям, что и в задаче о плоской апертуре. В работе [92] контакт в форме канала длиной  $L$  моделируется условием, что соответственные точки плоского контакта (в модели сферического растекания) соединяются одномерной передающей линией длиной  $L$ , при этом пространство переменных для задачи дифракции представляет прямое произведение сферы на отрезок. Такой прием оправдан, по крайней мере, для описания осевых низкочастотных колебаний, которые могут распространяться в каналах с абсолютно жесткими стенками [104]. Коэффициент прохождения для низкочастотных колебаний в этом случае принимает вид

$$T_0^L(kd) = \frac{(kd)^2}{(kd)^2 + 4 \cos^2(kL) [1 + \text{tg}(kL)/kd]^2}. \quad (66)$$

Видно, что функция  $T_0^L(x)$  представляет изрезанную ступень при  $L/d > 1$  (для достаточного длинного канала). Это является следствием интерференции волн, отраженных от входного и выходного отверстий канала.

В случае, когда частота падающей волны совпадает с частотами продольных колебаний канала ( $1 + \text{tg}(k_R L)/k_R d = 0$  или  $k_R \cong n\pi/L$  при  $L \gg d$ ), канал является эффективным передающим устройством для акустических волн. Плоские участки экранов  $\Sigma_1, \Sigma_2$  (см. рис. 1) на входе и выходе канала можно рассматривать как рупоры, причем в случае резонанса вместе с каналом в колебании участвуют и области экранов площадью  $S_R \sim (2\pi/k_R)^2$ . Это приводит к увеличению эффективной площади контакта в отношении  $S_R/S_0$  в области низкочастотных резонансов. Заметим, что для очень низких частот

(при  $k \ll k_R$ ) значения коэффициента передачи энергии в канале  $\bar{D}^L$  уменьшаются по сравнению со случаем плоского контакта,  $\bar{D}^L(0) = \bar{D}(0)/(1 + L/d)^2$  (см. рис. 8)

Сказанное выше относилось к каналам с абсолютно жесткими стенками, в математическом отношении удовлетворяющими условию Неймана. Каналы с затуханием волны на поверхности (условие Дирихле) исследованы весьма подробно в связи с задачей о квантово-механическом баллистическом транспорте электронов в контактах [109–115]. Так как в таких каналах невозможно распространение низкочастотных колебаний при  $k > 1/d$ , «эффект рупора» в этом случае не возникает.

Опишем влияние дифракционных эффектов на теплопроводность контактов, рассматривая отклонение теплового потока от закона  $T^4$ . Для этого рассмотрим функцию

$$F(T) = (60/\pi^6)(a^4/hu^2d^2)(\Theta/T)^4 Q(T,0), \quad (67)$$

нормированную таким образом, что  $F(T) \equiv 1$  в пределе геометрической оптики ( $kd \gg 1$ ). Для кубической решетки с постоянной  $a$  примем  $\Theta_D = hu/a$  ( $u$  – скорость звука).

Так как эти вычисления проводятся в низкочастотной области  $\omega \ll \omega_D$ , не существенны детали закона дисперсии при высоких частотах.

При равновесном (планковском) распределении фононов в «горячем» берегу контакта с температурой  $T$  результирующая температурная зависимость потока тепла уже не имеет осцилляций, присущих коэффициенту передачи энергии волны  $\bar{D}$ . Сохраняется только максимум, соответствующий низкочастотному возрастанию эффективной площади контакта в виде канала. При реалистических разме-

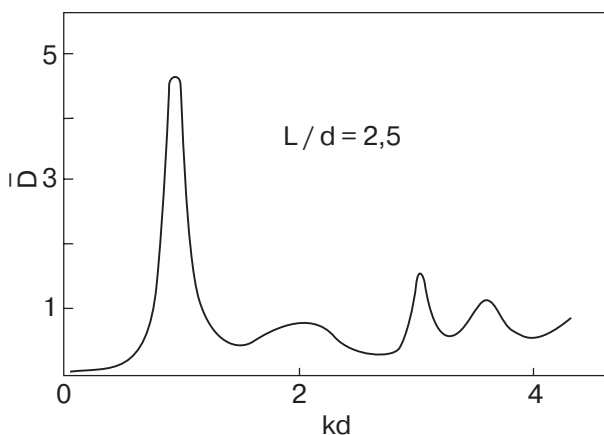


Рис. 8. Коэффициент передачи энергии фонона  $\bar{D}$  в контакте в виде канала с отношением длины к поперечнику  $L/d = 2,5$  [14]. Поверхность контакта считается абсолютно упругой, расчет проведен в модели сферического растекания.

рах контакта ( $d = 100a/\pi$ ) для достаточно длинных каналов ( $1,5 < L/d < 5$ ) дифракционные эффекты становятся существенными в области низких температур  $T_{\text{dif}} \simeq 10^{-3}\Theta_D$  (см. рис. 9).

При нулевых граничных условиях на поверхности контакта (случай сильного затухания) дифракционные эффекты сводятся к резкому уменьшению теплопроводности контакта при  $T < T_{\text{dif}}$ . В области рэлеевского излучения волн через плоский контакт

$$Q_{\text{Rayl}}(T,0) = 0,12\hbar^{-7}S_0d^4T^8 \sum_{\alpha} u_{\alpha}^{-6}. \quad (68)$$

При малых перепадах температуры на контактах ( $\Delta T \ll T_C$ ) поток тепла пропорционален  $\Delta T$  с коэффициентом, в который дают вклад возбужденные моды квантового транспорта фононов. При низких температурах вклад каждой квантовой моды с единичной амплитудой, как следует из уравнения (58) (см. [14]), равен  $(\pi^2/3h)T$ . (Заметим, что в 3D-контактах между трехмерными тепловыми резервуарами моды  $(2n + 1)$ -кратно вырождены и полный тепловой поток в многомодовом режиме пропорционален  $T^3$ , а не  $T$ .) Величина  $(\pi^2/3h)T$  трактуется обычно как «квант теплопроводности», хотя это выражение справедливо в достаточно специальном случае термализации носителей тепла. В связи с этим можно проанализировать выражение для потока тепла, переносимого фононами с фиксированной

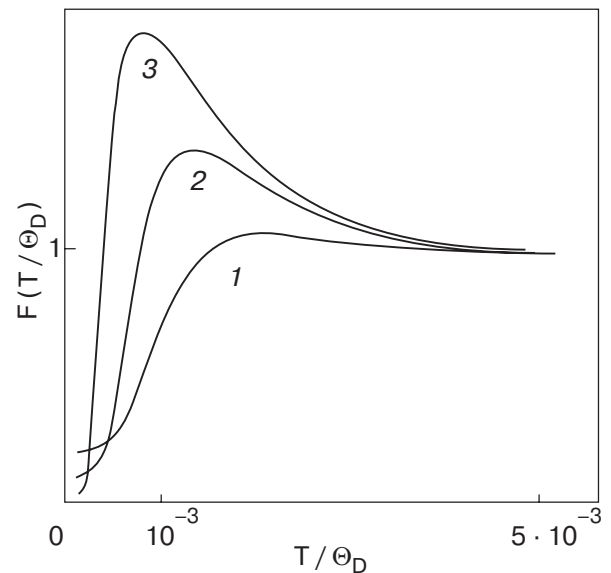


Рис. 9. Приведенный поток энергии фононов, рассчитанный в модели сферического растекания для цилиндрических контактов диаметром  $d$  и длиной  $L$  [14]. Поверхность контакта считается абсолютно упругой. Расчет проведен для случая кубической элементарной ячейки с периодом  $a$  в предположении линейного закона дисперсии фононов,  $d = 100a/\pi$  при различных  $L/d$ : 1,5 (1), 2,5(2), 3,5 (3).

круговой частотой  $\omega_0$  (59), полученное в работе [14]. Для нормированного по частоте распределения коэффициент  $n = 2\pi$ , а каждая мода теплового потока дает вклад, равный  $\hbar\omega_0$ . Таким образом, «квант спектральной плотности теплового потока» равен, как и следовало ожидать,  $\hbar\omega$ .

В 1998 году две группы авторов [26,27] представили расчет квантованного транспорта в одномерной фононной системе длинного контакта ( $L \gg d$ ), соединяющего двумерные тепловые резервуары (см. также [28,29]). В длинных микромостиках существуют 4 квантовые низкочастотные моды для различных типов упругих колебаний (продольная, две поперечных и торсионная) и, кроме того, сдвиговые моды оптического типа (общие с двумерным резервуаром). Энергия возбуждения  $E_0$  оптических мод зависит от толщины резервуаров  $a_0$  и мостиков. При  $a_0 = 50$  нм в GaAs  $E_0$  соответствует 1,62 К. Согласно этим расчетам, квантованный фононный поток тепла в длинных GaAs-микромостиках, имеющих сечение  $50 \times 50$  нм, при  $T \sim 1$  К (когда тепловой поток определяется первой квантовой модой) становится равным  $4(\pi^2/3\hbar)T\Delta T$ . При меньших температурах величина потока зависит от дифракционных эффектов, возникающих на соединении резервуаров и мостиков, «эффект рупора» в одномерной фононной системе не возникает. Эта картина, качественно подобная одномерному низкотемпературному квантованному транспорту в трехмерных контактах, дополняется активацией оптических мод, дающих вклад в тепловой поток при  $T \sim 0,5$  К [23,24].

## 5. Рассеяние фононов на плоских дефектах кристаллической решетки

### 5.1. Динамика поверхности кристалла с адсорбированным монослоем

Совершенно очевидно, что наличие дефектов (локальных или протяженных) существенно влияет на теплоперенос. Рассмотрим один из интереснейших процессов, происходящих при низкотемпературном тепловом транспорте с участием дефектов — процесс резонансного прохождения фононов.

В тех ситуациях, когда выполняются условия баллистического транспорта, приведенные выше (см. разд. 2), границу раздела между контактами в хорошем приближении можно аппроксимировать бесконечной плоскостью. В работах [116,117] на микроскопическом уровне рассмотрено влияние слабосвязанного примесного монослоя на различные низкотемпературные колебательные характеристики, в том числе и на теплоперенос. В качестве модели выбран ГЦК кристалл, в котором взаимодействие между ближайшими соседями в глубине

кристалла описывается силовой константой  $\alpha$ , а взаимодействие примесного монослоя с поверхностью параметром  $\gamma\alpha$  ( $\gamma \ll 1$ ). В этих работах показано, что при падении на поверхность из глубины твердого тела волны с амплитудой  $A$  и с волновым вектором  $\mathbf{k}(\chi, k_3)$  амплитуда смещения поверхностного примесного слоя  $U_0$  задается соотношением:

$$\frac{U_0}{A} = 8i\gamma \sin k_3 (\cos k_1 + \cos k_2)^2 \times \left\{ -4\gamma^2 (\cos k_1 + \cos k_2) + \left( 4\gamma - \frac{M\omega}{\alpha} \right) + [8 + 4\gamma - 4 \cos k_1 \cos k_2 - \frac{m\omega^2}{\alpha} - 2(\cos k_1 + \cos k_2)e^{-ik}] \right\}^{-1} \quad (69)$$

$\chi(k_1, k_2)$  — двумерный волновой вектор в плоскости поверхности,  $m$  — масса атомов кристалла,  $M$  — масса атомов примесного монослоя. Представляет интерес величина  $|U_0/A|^2$ , определяющая мощность звукового излучения. Эта величина принимает наибольшее значение в длинноволновой области при

$$\omega_0^2 = \frac{4\alpha\gamma}{M} \quad (70)$$

и в окрестности этого значения представляется в виде

$$\left| \frac{U_0}{A} \right|^2 = \frac{64\gamma^2}{(4\gamma - M\omega^2/\alpha)^2 + 16\gamma^4/k^2 \cos^2 \theta}, \quad (71)$$

где  $\theta$  — угол падения волны на поверхность. Максимальное значение  $|U_0/A|^2$  при нормальном падении составляет  $4m/\gamma M \gg 1$ . Таким образом, речь идет о резонансных (квазиповерхностных) колебаниях полуограниченного кристалла. При  $\omega \rightarrow 0$  величина  $U_0/A \rightarrow 2$ , что соответствует переходу к сплошной среде. Типичные частотные зависимости  $|U_0/A|^2$  в длинноволновой области приведены на рис. 10.

Значительный вклад в низкотемпературную теплопередачу через границу могут дать лишь те поверхностные состояния, которые сильно локализованы у границы и являются низкочастотными. Кроме таких резонансных состояний, имеется еще одно сильно локализованное у границы поверхностное состояние, которое в первом приближении по  $\gamma$  имеет не зависящую от  $\chi$  (при достаточно больших  $\chi$ ) частоту, совпадающую с  $\omega_0$  (71). В этом приближении рассматриваемое состояние представляет собой колебание примесного монослоя при поч-

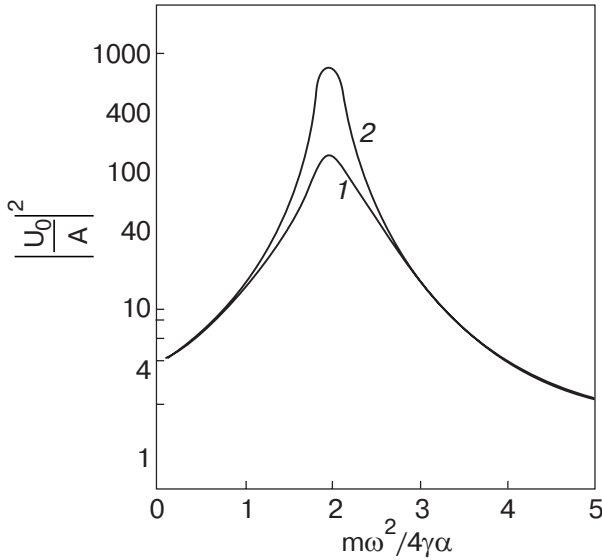


Рис. 10. Зависимость величины  $|U_0/A|^2$  от частоты падающей объемной волны при нормальном падении:  $M/m = 0,5$ ;  $\gamma = 0,05$  (1);  $0,01$  (2) [116].

ти неподвижной подложке. Схематично низкочастотный спектр в такой модели представлен на рис. 11.

Если предположить, что данный кристалл граничит с жидкостью (например, жидкий гелий), то колебания поверхностного слоя кристалла приводят к излучению звука в окружающую гидродинамическую среду.

Среднюю интенсивность излучаемого звука с частотой  $\omega$  запишем в виде

$$\overline{W(\omega)} = 0,5 \rho_f c_f \omega^2 |U_0(\omega)|^2 S. \quad (72)$$

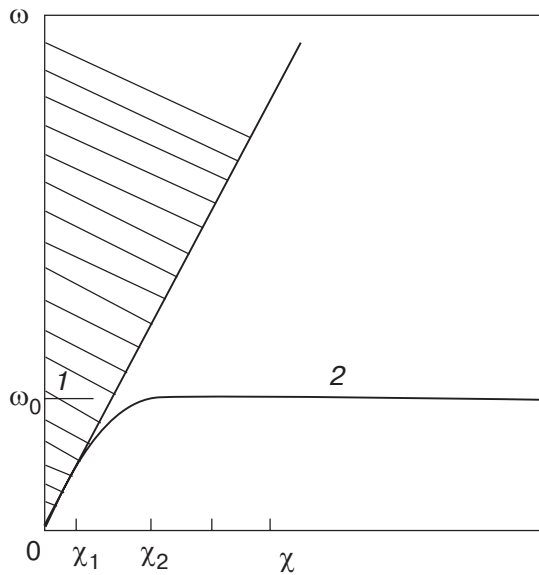


Рис. 11. Низкочастотный спектр в рассматриваемой модели: 1 – резонансное состояние, 2 – поверхностное состояние [116].

Из законов сохранения энергии и импульса для фононов вытекает ограничение на величину двумерного волнового вектора поверхностной волны, излучающей звук в жидкость:

$$x^2 \leq \frac{\omega_S^2 a^2}{c_f^2} = \gamma \frac{c^2}{c_f^2} \frac{m}{M}, \quad (73)$$

где  $a\sqrt{2}$  – расстояние между ближайшими соседями. Таким образом, предельно коротковолновые поверхностные состояния являются неизлучающими (ниже считаем  $\gamma(m/M)(c^2/c_f^2) < 1$ ).

Наряду с излучением происходит поглощение фононов, падающих из жидкого гелия на поверхность; разность этих двух потоков энергии определяет результирующий тепловой поток  $Q$ . Таким образом, коэффициент теплопередачи границы равен

$$h = \frac{1}{S} \frac{d}{dt} \int \overline{W(\omega)} n(T) d\tau_\omega, \quad (74)$$

где  $n(T)$  – равновесная функция распределения фононов;  $d\tau_\omega$  – элемент фазового объема. Используя формулы (72)– (74), получаем

$$h(T) = h_0(T) + h_r(T) + h_S(T), \quad (75)$$

$$h_0(T) = \frac{4\pi^2}{15h^3} \frac{\rho_f c_f}{\rho c^3} T^3 \text{ при } T \ll T_\gamma; \quad (76)$$

$$h_r(T) = \frac{15}{16\pi^3} \frac{\rho_f c_f}{\rho c^3} \sqrt{\frac{m}{M_\gamma}} \left(\frac{T_\gamma}{T}\right)^5 \times \frac{\exp(T_\gamma/T)}{(\exp(T_\gamma/T) - 1)^2} h_0(T); \quad (77)$$

$$h_S(T) = h_r(T) \frac{c^2}{c_f^2}. \quad (78)$$

Здесь

$$T_\gamma = \sqrt{\gamma} \frac{m}{M} \frac{\hbar c}{a}$$

( $\hbar c/a$  – порядка дебаевской температуры). При  $\gamma = 0,01$  и типичных значениях дебаевской температуры  $T_\gamma < 10$  К.

При  $T \rightarrow 0$  величина  $h_0(T)$  в (75) соответствует результату Халатникова [44,45] и дает главный вклад в  $h(T)$ . Отметим, что, несмотря на скалярный характер модели,  $h_0(T)$  совпадает с результатом Халатникова (полученным в рамках теории упругости с учетом объемных волн всех поляризаций и поверхностных рэлеевских волн) с точностью до численного множителя, близкого к единице.

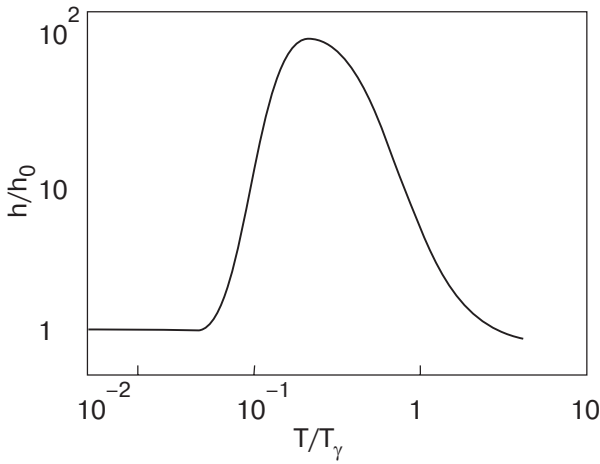


Рис. 12. Температурная зависимость коэффициента теплопередачи границы:  $M/m = 0,5$ ;  $\gamma = 0,01$ ;  $(c^2/c_f^2) = 10$  [116].

Слагаемое  $h_r(T)$  в формуле (75) описывает вклад резонансных колебаний в теплопередачу,  $h_s(T)$  описывает вклад поверхностных колебаний. При вычислении  $h_s(T)$  интегрирование по  $\chi$  проводилось от нуля, что привело к относительно небольшой погрешности.

При  $T \sim T_\gamma$  имеем  $h_0(T) \ll h_r(T)$ , что позволяет привести в формуле (76) выражение для  $h_0(T)$ , справедливое при предельно низких температурах.

На рис. 12 приведена температурная зависимость отношения  $h(T)/h_0(T)$ . Вблизи  $T = 1/5T_\gamma$  следует ожидать резкого увеличения теплопередачи через границу по сравнению с предсказаниями теории Халлатникова. Такое увеличение (на 1–2 порядка) наблюдалось в ряде экспериментов [118–121].

Наличие одного очень резкого максимума в температурной зависимости теплопередачи связано с выбором модели — имеется лишь одна резонансная частота. В реальной ситуации может существовать несколько таких частот, что должно привести к более плавной (и даже расщеплению) зависимости  $h(T)$ . Примеры таких ситуаций нами будут рассмотрены ниже.

Итак, в настоящем разделе описан механизм резонансной низкотемпературной теплопередачи через поверхность, адсорбированную слабосвязанный примесный монослой.

### 5.2. Резонансное взаимодействие упругих волн с двумерным дефектом на границе контакта

Транспорт фононов через межкристаллическую границу, содержащую слой слабосвязанных примесей, можно описать с помощью «капиллярной» теории [40, 122–127]. Пользуясь терминологией теории упругой среды, рассмотрим примесный слой как двумерный дефект, лежащий в плоскости  $z = 0$  и

разделяющий объемные кристаллы, для которых упругие напряжения и смещения отмечены индексами (1) и (2). Характеристики плоского дефекта указаны индексом  $s$ . Можно получить граничные условия для объемных напряжений  $\sigma_{ik}^{(1,2)}$  и смещений  $u_i^{(1,2)}$  в плоскости  $z = 0$ , приравняв нулю вариацию полной (объемной и поверхностной) свободной энергии межкристаллической границы по отношению к независимым динамическим переменным  $u_i^{(1,2)}$  и  $u_i^s$ :

$$\sigma_{in}^{(1)} = -\delta F_s / \delta u_i^{(1)}, \sigma_{in}^{(2)} = \delta F_s / \delta u_i^{(2)}, \delta F_s / \delta u_i^s = 0. \quad (79)$$

Здесь  $\sigma_{in} = \sigma_{ik}^{nk}$ ;  $n_i$  — единичный вектор, нормальный к границе раздела и направленный из среды 1 в среду 2.

Используя уравнения (79) и учитывая кинетическую энергию границы раздела, получим следующие граничные условия для упругих напряжений в плоскости  $z = 0$ :

$$\sigma_{in}^{(1)} - \sigma_{in}^{(2)} = \rho_s \frac{\partial^2 u_i^s}{\partial t^2} + g_{\alpha\beta} \nabla_\alpha \nabla_\beta u_i^s + \delta_{i\beta} h_{\alpha\beta\gamma\delta} \nabla_\alpha u_\gamma^s, \quad (80)$$

$$\sigma_{in}^{(1)} = A_{ik}^{(1)} (u_k^s - u_k^{(1)}), \quad (81)$$

$$\sigma_{in}^{(2)} = A_{ik}^{(2)} (u_k^{(2)} - u_k^s). \quad (82)$$

В сочетании с граничными условиями (80)–(82) уравнения (79) являются обобщением для твердых тел известной формулы избыточного капиллярного давления Лапласа. Уравнения (79)–(82) описывают линейную связь между смещениями атомов плоского дефекта и соответствующими упругими силами, действующими на границу раздела (закон Гука для двумерного дефектного слоя).

Используя выражения (79)–(82), можно проанализировать частотные и угловые зависимости коэффициентов отражения  $r$ , прохождения  $d$  и величины поверхностного смещения  $u_i^s$  при падении упругой волны на примесный слой, разделяющий два кристалла.

Проанализируем ситуацию, когда примесный двумерный слой разделяет две акустически идентичные среды ( $Z_1 = Z_2$ , например, дефект упаковки в глубине кристалла). С использованием условий (79)–(82) макроскопической динамики двумерного дефекта можно получить [125] следующие соотношения для амплитуд отражения, прохождения и поверхностного смещения в случае сдвиговой волны, падающей под углом  $\theta$  к нормали к поверхности и поляризованной в плоскости падения  $xOz$ :



$$r = \frac{1}{\Delta_1} \left\{ A_2 C_{44}^2 k \cos^2 \theta - 0,5 \left[ \frac{\rho_s}{\rho} C_{44} k - (g_1 + h_{66}) k \sin^2 \theta \right] (A_2^2 + C_{44}^2 k^2 \cos^2 \theta) \right\}, \quad (83)$$

$$d = iA_2^{(2)} C_{44} k \cos \theta / \Delta_1, \quad (84)$$

$$u_0^s = \frac{u_0}{\Delta_1} (iA_2^2 C_{44} k \cos \theta + A_2 C_{44}^2 k \cos^2 \theta), \quad (85)$$

$$\Delta_1 = iA_2^2 C_{44} k \cos \theta + A_2 C_{44}^2 k \cos^2 \theta + 0,5 \left[ \frac{\rho_s}{\rho} C_{44} k - (g_1 + h_{66}) k \sin^2 \theta \right] (A_2^2 + C_{44}^2 k^2 \cos^2 \theta), \quad (86)$$

где  $g_1 = g_{xx}$ ;  $h_{66} = h_{xyxy}$ ;  $A_2 = A_{yy}^{(1)} = A_{yy}^{(2)}$ .

Выражения (83)–(86) получены при условии, что решения (79)–(83) искались в виде

$$u_y^{(1)} = u_0 (\exp(ik \cos \theta z) + r \exp(-ik \cos \theta z)) \times \exp(ik \sin \theta x - i\omega t);$$

$$u_y^{(2)} = u_0 d \exp(ik \cos \theta z + ik \sin \theta x - i\omega t);$$

$$u_y^{(s)} = u_0^s \exp(-ik \sin \theta x - i\omega t);$$

$$\omega^2 = k^2 C_{44} / \rho. \quad (87)$$

Если двумерный дефект образован слоем легких атомов, слабосвязанных с берегами кристаллов, т.е. выполняются условия  $A_2 \rho_s \ll \rho C_{44}$ ,  $\omega \gg A_2 (\rho C_{44})^{-1/2}$ , то такая система примесных атомов характеризуется наличием низкочастотных оптических колебаний с резонансной частотой

$$\omega \simeq \omega_0 \simeq (2A_2 / \rho_s)^{1/2}. \quad (88)$$

На этой частоте амплитуда смещений примесных атомов значительно превышает амплитуду смещений атомов кристалла:

$$u_0^s / u_{1,2} = (C_{44} \rho / A_2 \rho_s)^{1/2} \gg 1. \quad (89)$$

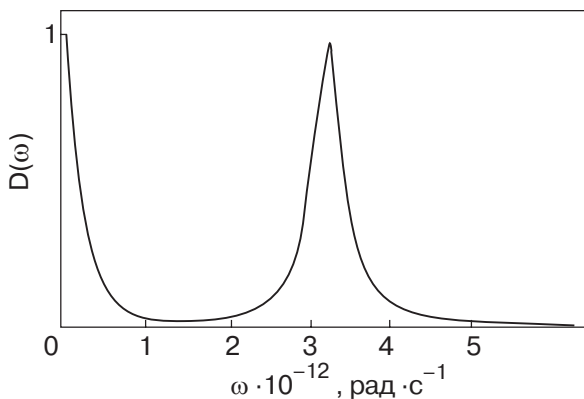


Рис. 13. Частотная зависимость коэффициента переноса энергии при наличии слабосвязанного примесного слоя между кристаллами КВг–КВг [40].

Существенное увеличение амплитуды колебаний в промежуточном слое (по сравнению с контактирующими берегами) чрезвычайно важно для объяснения экспериментальных результатов, которые будут обсуждаться ниже.

В этом случае амплитуды прохождения и отражения (83)–(86) имеют следующие особенности. В пределе очень низких частот ( $\omega \ll \omega_0$ ) и больших длин волн ( $kh \ll 1$ ) имеем почти полное неотражение и полное прохождение падающей упругой волны через очень тонкий слой в объем кристалла ( $|r| < 1$ ,  $d \simeq 1$ ). При более высоких частотах вне резонансной области ( $\omega \neq \omega_0$ ) имеем почти полное отражение и непрохождение ( $|r| \simeq 1$ ,  $|d| < 1$ ), что обусловлено слабой акустической связью между эквивалентными контактирующими кристаллами. Внутри резонансной области ( $\omega \approx \omega_0$ ) при нескользающих углах падения связь между контактирующими кристаллами эффективно возрастает и происходит полное прохождение волны через плоский дефект ( $|r| \ll 1$ ,  $d \simeq 1$ ) (рис. 13).

### 5.3. Многоканальное интерфейсное рассеяние в точечном контакте

В работах [10,36] экспериментально изучен тепловой поток в баллистическом режиме в точечных контактах Si–Cu в интервале температур 0,1–10 К. (Модель такого контакта изображена на рис. 14.) В интервале 0,1–1 К наблюдался аномально большой пик редуцированного теплового потока. Теоретически этот пик предсказан в работе [14], в которой была создана теория квантового транспорта фононов в точечных контактах. Заметим, что аналогичная теория квантового транспорта электронов построена в работах [26,28,29]. В работах [10,36] экспериментально обнаружены дополнительные пики на температурной зависимости редуцированного теплового потока при температурах, превышающих 2 К (рис. 15). Как следует из теории квантового микроконтактного транспорта фононов [14], в этой области температур транспорт фононов реализуется в режиме геометрической оптики.

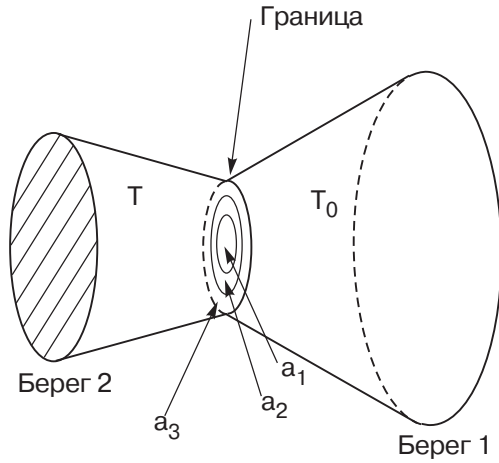


Рис. 14. Схематическая модель контакта;  $T$  и  $T_0$  — температуры массивных берегов контакта.;  $a_1, a_2, a_3$  — зоны с различным составом интерфейсного слоя.

Таким образом, эти пики не могут быть связаны с проявлением квантовых дифракционных эффектов. Поэтому для их объяснения необходимо рассмотреть другой механизм баллистического транспорта фононов через границу раздела двух сред.

Анализируя данные работ [10,36] с помощью рассмотренной выше модели, можно сделать вывод, что серия аномальных пиков редуцированной теплопроводности выше 2 К обусловлена многоканальным резонансным прохождением фононов через примесные слои, находящиеся между двумя контактирующими твердыми средами. Для описания фононного транспорта используем капиллярную теорию прохождения упругих волн через планарный дефект [122–127].

В предыдущем разделе описан механизм резонансного прохождения фононов через планарный дефект в предположении, что имеется одна резонансная частота. Такая ситуация соответствует тому, что промежуточный слой, через который происходит резонансная теплопередача, однороден вдоль

всей границы контакта как по составу примесей, так и по толщине. В реальных же экспериментах необходимо учитывать, что поверхность контакта, как правило, представляет собой набор участков, на которых состав примесей и толщина слоя могут быть различны. В этом случае можно говорить, что разным участкам плоского слоя соответствуют различные каналы фононного транспорта. Каждому из этих каналов соответствует своя резонансная частота. Так как рассматривается транспорт фононов при температурах выше 2 К, то он подчиняется законам геометрической оптики. Следовательно, полный поток фононов через контакт является суммой потоков в отдельных каналах. Пусть  $S_n$  — площадь части соответствующего контакта с номером  $n$ ,  $D_n(\omega)$  — коэффициент передачи энергии фонона для  $n$ -канала, характеризующегося резонансной частотой прохождения  $\omega_n$ . При этом эффективный коэффициент многоканального резонансного прохождения фононов описывается выражением

$$D(\omega) = \frac{\sum_{n=1}^{n_{\max}} D_n(\omega) S_n}{\sum_{n=1}^{n_{\max}} S_n} \quad (90)$$

Капиллярная теория транспорта фононов позволяет учитывать различные типы примесей и различные толщины каналов с помощью одного параметра  $\rho_s$ . Предполагая, что все каналы однородны по составу примесей, можно записать

$$\rho_{sn} = \rho_{s1} n, \quad (91)$$

где  $\rho_{s1}$  — избыточная поверхностная плотность молекулярного слоя минимальной толщины,  $n$  — число молекулярных слоев примесей в канале, которое служит номером канала. В соответствии с формулой (88) меняются и частоты  $\omega$ , обеспечивающие резонансное прохождение через микроконтакт.

Развитую выше теорию многоканального резонансного транспорта фононов через границу раздела двух сред можно использовать для интерпретации экспериментов по измерению баллистического транспорта фононов в микроконтакте Si–Cu. В работе [18] обнаружен низкотемпературный квантовый баллистический транспорт фононов в интервале температур 0,1–3 К. Кроме того, в интервале температур 3–10 К измерен редуцированный микроконтактный поток тепла в режиме геометрической оптики для фононов. Результаты этой работы показали, что в этом температурном интервале редуцированный поток тепла через микроконтакт является немонотонной функцией температуры и имеет четко

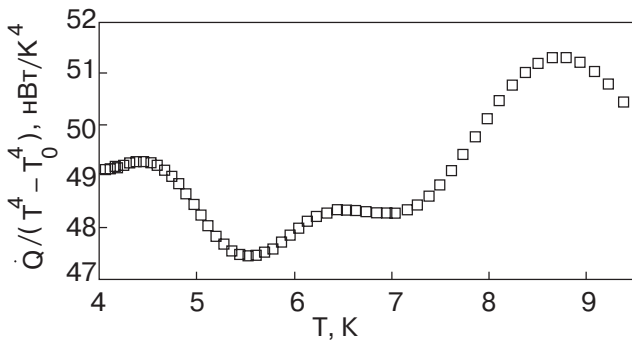


Рис. 15. Экспериментально наблюдаемая температурная зависимость редуцированного теплового потока в точечных контактах Si–Cu выше 2 К [10,36].

выраженные максимумы при температурах  $T_1 = 4,46$  К,  $T_2 = 6,53$  К,  $T_3 = 8,77$  К. Нам представляется, что наблюдавшаяся в работе [10] серия пиков редуцированного теплового потока может быть объяснена с помощью модели, развитой в предыдущих разделах. Появление пиков является характерным следствием резонансного транспорта. В случае одноканального резонансного транспорта, изученного в работе [38], использована модель узкого резонансного пика, сводящаяся к следующему.

Полный поток тепла  $\dot{Q}$  может быть записан как сумма баллистического потока  $\dot{Q}_B$  и резонансного потока  $\dot{Q}_R$ . Предполагая узкий резонансный пик на частоте  $\omega_0^\alpha$ , получаем формулу, описывающую температурную зависимость потока тепла:

$$\dot{Q}(T, T_0) = C(T^4 - T_0^4) + \sum_{\alpha} K_{\alpha} \left[ \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0^{\alpha}/T) - 1} - \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0^{\alpha}/T_0) - 1} \right]. \quad (92)$$

Чтобы выделить оба вклада в тепловой поток, необходимо разделить величину теплового потока на  $(T^4 - T_0^4)$ . Эту модель (использующую только одну частоту) можно применить для объяснения экспериментальных данных с коэффициентом корреляции 0,95. Резонансная частота  $\omega_0$  связана с  $T_{\max}$  соотношением  $\hbar\omega_0 = 3,89T_{\max}$ .

Используя модель многоканального резонансного транспорта, модифицируем выражение (92) следующим образом:

$$\frac{\dot{Q}}{T^4 - T_0^4} = \frac{1}{T^4 - T_0^4} \times \sum_{n=1}^3 K_n \left\{ \left[ \exp \left( 3,89 \frac{T_n}{T} \left( 1 + \frac{1}{T_s^2} (T - T_n)^2 \right) \right) - 1 \right]^{-1} - \left[ \exp \left( 3,89 \frac{T_n}{T_0} \right) - 1 \right]^{-1} \right\} + C. \quad (93)$$

В выражении (93) учитывается наличие трех каналов резонансного транспорта. Температура  $T_0 = 0,15$  К – постоянная температура холодного берега контакта. Величины  $T_n$  ( $n = 1, 2, 3$ ) соответствуют температурам, при которых наблюдается максимум приведенного теплового потока. Постоянная  $C$  – среднее значение приведенного теплового потока через точечный контакт в температурной области от 4 до 9 К. Как следует из экспериментальных данных, величина  $C$  равна  $49,55$  нВт/К<sup>4</sup>. Коэффициенты  $K_n$  пропорциональны интенсивностям пиков, наблюдаемых экспериментально:

$$K_1 = 0,7 \text{ нВт}, K_2 = 2 \text{ нВт}, K_3 = 50 \text{ нВт}. \quad (94)$$

Дополнительное слагаемое, содержащее  $T_s$ , эффективно учитывает неустойчивость промежуточного слабосвязанного примесного слоя вблизи резонанса, которая обусловлена тем, что, согласно выражению (89),  $u_0^s/u_{1,2} \gg 1$ . Обсуждение роли адсорбционно-десорбционного механизма примесных атомов проведено в работе [116] (см. также [17]). Оптимальное соответствие между экспериментальными и теоретическими результатами получено при  $T_s = 1,5$  К.

Результаты численного расчета по формуле (93), приведенные на рис. 16, свидетельствуют о том, что предложенная модель достаточно детально описывает результаты эксперимента, приведенные на рис. 15. Заметим, что используемая в расчетах температура  $T_s$  соответствует энергии связи примесного слоя с берегами контакта. Температура  $T_s$  на два порядка меньше дебаевской температуры кристаллов, образующих берега контактов. Это согласуется с тем, что константа связи примесного слоя с берегами контактов на два порядка меньше константы связи внутри кристаллов, образующих этот контакт [40].

Формулы (91), (92) позволяют оценить параметры различных каналов фононного транспорта. Коэффициенты  $K$  пропорциональны площадям различных интерфейсных слоев. Приняв площадь канала с наибольшей резонансной частотой за единицу, получим соотношение между площадями слоев, участвующих в резонансном транспорте: 1:0,04:0,014. Комбинируя формулы (91), (92) и (94), получим соотношение

$$\left( \frac{T_{\max n}}{T_{\min m}} \right)^2 = \frac{\rho_f^m}{\rho_f^n} = \frac{L_m}{L_n}. \quad (95)$$

Из экспериментальных данных следует

$$\frac{L_2}{L_3} = 1,8 \pm 0,2, \frac{L_1}{L_3} = 3,8 \pm 0,2, \quad (96)$$

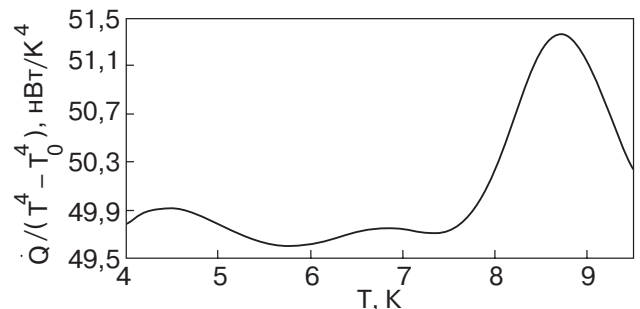


Рис. 16. Результаты численного расчета по формуле (93) в рассматриваемой модели.

$L_3$  соответствует количеству слоев в канале с наибольшей резонансной частотой (наименьшей  $\rho_s$ ). Из соотношения (96) вытекает, что наиболее низкочастотный из рассматриваемых каналов ( $n = 1$ ) содержит максимальное число слоев (примерно в 4 раза больше, чем относительно высокочастотный канал с номером  $n = 3$ ), канал с промежуточной частотой ( $n = 2$ ) содержит фактически в 2 раза больше слоев, чем высокочастотный с  $n = 3$ .

Рассмотренный механизм резонансного транспорта фононов, по-видимому, характерен для теплопередачи между двумя средами. Эффект резонансной теплопередачи является существенным, например, в теплопередаче между твердым телом и жидким гелием при наличии согласующего слоя [116,17]. В точечных контактах роль резонансного слоя могут играть адсорбированные на интерфейсе молекулы воды или отвердевших инертных газов. Структура слоев воды на поверхности кристаллического кремния или кремниевых субстратов теоретически моделировалась в работах [128–130], экспериментально изучалась в [131]. Результаты, приведенные в обзоре, дают дополнительную информацию о динамических свойствах слоев, образующихся на поверхности кремниевых кристаллов.

Пики редуцированного теплового потока наблюдаются и в других контактах, например КВг–КВг и КВг–Си [36]. В этих контактах наблюдался низкотемпературный максимум при температуре  $(5,7 \pm 0,2)$  К, который также можно объяснить с помощью теории резонансного транспорта [132]. Отметим, что явление резонансного транспорта позволяет изучать структуру интерфейсных слоев и дает возможность управлять теплопередачей между двумя средами с помощью контролируемого введения в интерфейс слоев примесей, слабосвязанных с берегами контакта

## 6. Модификация фононного спектра в наноструктурах

### 6.1. Вклад границ в фононные спектральные плотности ограниченных систем

Уменьшение размеров контактов приводит к появлению нескольких типов размерных эффектов, связанных с характерными масштабами, в которых реализуются различные процессы в твердых телах. При характерных размерах контактов от 100 до 10 нм в области низких температур устанавливается баллистический режим транспорта заряда и тепла в микроструктурах, так как в этих условиях длины неупругого рассеяния носителей велики по сравнению с размерами контакта. Однако в этих масштабах законы дисперсии носителей еще можно считать

близкими к аналогичным законам дисперсии в массивных твердых телах.

При размерах контактов от 10 до 1 нм становится существенным влияние искажений кристаллической структуры в области контакта на вид колебательного спектра решетки. Даже при сохранении правильной кристаллической структуры в зоне контакта вкладом поверхностных колебательных состояний уже нельзя пренебрегать. Этот эффект относится к области мезоскопических явлений. Наконец, при размерах контактов порядка 1 нм («одноатомные контакты») проявляются эффекты размерного квантования носителей заряда в микроструктуре [133,134].

Анализ колебательных характеристик атомов таких систем удобно проводить методами, основанными на трансляционной инвариантности решетки, они пригодны для описания как кристаллических, так и неупорядоченных систем. Весьма информативной характеристикой колебаний неупорядоченных систем, а также сложных кристаллических решеток или кристаллов с дефектами, является так называемая локальная плотность на узле [135], которая описывает вклад данного узла в колебательный спектр всей системы. Для вычисления локальных плотностей могут быть использованы методы, характерные для расчетов спектральных характеристик регулярных кристаллических структур, например разложение по плоским волнам [135–137]. Однако такой подход приводит, как правило, к очень большому, зачастую непреодолимому математическим трудностям при конкретных вычислениях данных характеристик. Обойти эти трудности позволяет метод якобиевых матриц [138–141], с помощью которого в гармоническом приближении можно находить распределения колебаний по частотам, не вычисляя дисперсионные соотношения и вектора поляризации. Кроме того, этот метод позволяет найти более подробную, чем содержащаяся в локальных плотностях, информацию о частотном спектре колебаний системы.

В работе [142] на основании результатов численного моделирования показано, что локальные плотности для атомов, составляющих микроструктуру, существенно отличаются от спектральной плотности регулярной кристаллической решетки. Происходит значительное относительное возрастание числа низкочастотных колебаний атомов микроструктуры. Прослежены различия между локальными плотностями «поверхностных» и «реберных» атомов в контакте. Так как метод микроструктурной спектроскопии позволяет находить спектральную функцию электрон-фононного взаимодействия, которая является интегральной характеристикой кристалла, про-



ведена сравнительная оценка вкладов в микроконтактный спектр области контакта и его массивных берегов. Показано, что модификация микроконтактного спектра становится существенной для контактов с размерами порядка десяти межатомных расстояний. При этом наиболее эффективно размерная модификация спектра проявляется в контактах типа вытянутой в длину перемычки.

Для контакта характерно наличие большого числа «дефектных» атомов, лежащих вблизи ребер или граней перемычки. Кроме того, колебательные характеристики атомов, лежащих в приповерхностных областях берегов, будут заметно отличаться от соответствующих характеристик объемных атомов.

Будем считать, что берега контакта и сам контакт сделаны из одного диэлектрика, имеют ГЦК структуру и соизмеримы между собой. Предположим также, что контакты представляют собой квадратную в сечении перемычку между двумя поверхностями полуграниченных кристаллов, совпадающими с кристаллографическими плоскостями типа (100) и образованными обрывом связей между соседними плоскостями. Связанное с релаксацией изменение взаимодействия атомов в зоне контакта, на его поверхностях и поверхности берегов не учитывалось.

Геометрия контакта и принятая система координат изображены на рис. 17. Численные расчеты выполнены для контакта, имеющего длину  $L$  равную 8 межслоевым расстояниям. С целью изучения влияния размеров сечения контакта на его динамические характеристики рассмотрены контакты, имеющие в сечении форму квадрата со стороной  $6a$  и  $12a$  ( $a$  — постоянная решетки).

На рис. 18 приведены результаты расчета функции  $\rho(\omega)$  для атома (033), находящегося в центре

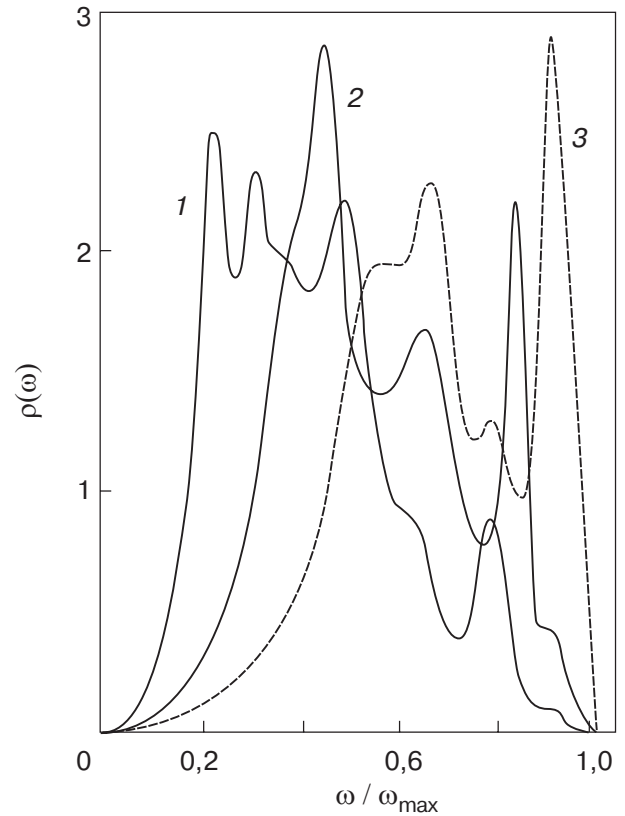


Рис. 18. Локальные плотности для атомов, находящихся в центре ребра контакта с  $l_z = 6a$  (1), свободной поверхности (001) ГЦК кристалла (2) и в объеме ГЦК кристалла (3) [15].

ребра контакта с  $l_z = 6a$  (кривая 1). Для сравнения приведены результаты расчета аналогичных функций для атомов, находящихся на свободной поверхности (кривая 2) и в объеме ГЦК кристалла (кривая 3).

Безусловно, характер колебаний атомов зависит не только от их положения, но и от размеров сечения контакта. Расчеты показывают, что для атомов, находящихся в центрах сечений  $x = 0$ , увеличение размеров сечения в 2 раза приводит к существенному понижению числа низкочастотных состояний: локальная плотность на узле (000) перемычки с сечением  $l_z = 12a$  практически совпадает с локальной плотностью объемного атома. Однако для атомов (033) и (066), находящихся на ребрах, увеличение размера сечения не приводит к заметному уменьшению числа низкочастотных состояний. Отметим также, что по мере удаления атома от грани перемычки его локальная плотность деформируется к виду, характерному для спектральной плотности атомов свободной поверхности, а для атомов, находящихся на самой грани, она будет существенно зависеть от размеров грани.

Зависимость локальных плотностей атомов от линейных размеров сечения контакта хорошо видна

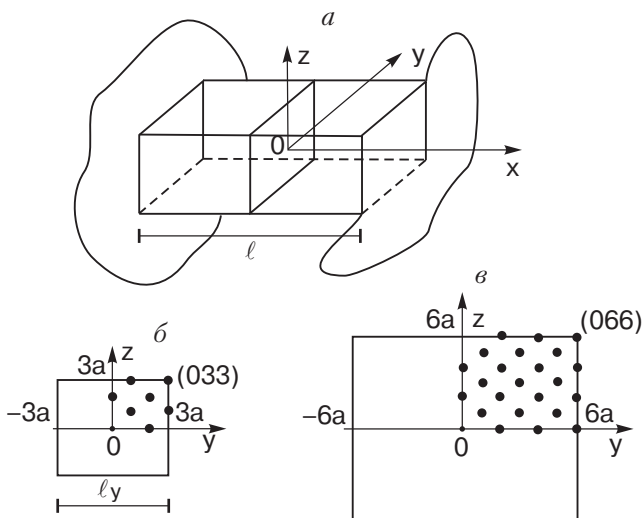


Рис. 17. Схематическая модель микроконтакта (а) в сечении контакта со стороной  $6a$  (б) и  $12a$  (в).



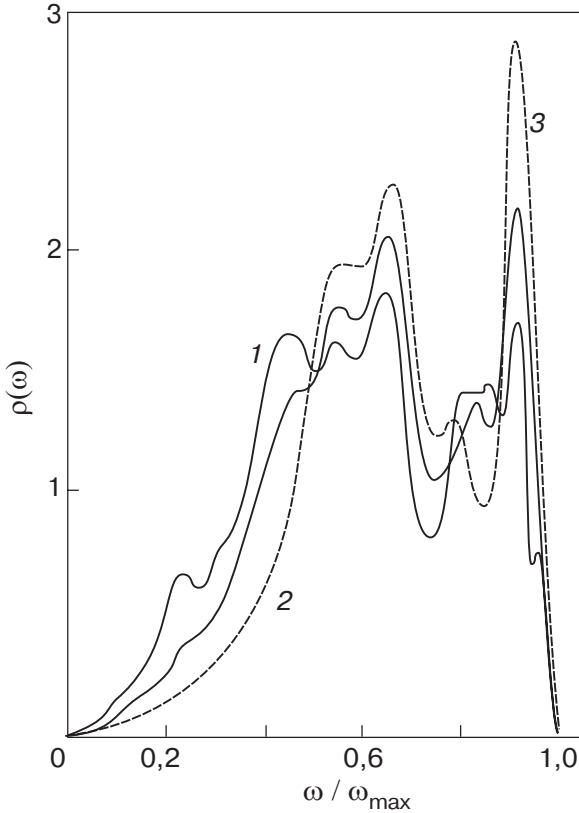


Рис. 19. Локальные плотности, усредненные по всем атомам центрального сечения  $x = 0$ ; кривая 1 —  $l_z = 6a$ ; кривая 2 —  $l_z = 12a$ , кривая 3 — плотность фононных состояний неограниченного ГЦК кристалла [15].

на рис. 19, где приведены результаты расчета усредненных по всем атомам сечения  $x = 0$  локальных плотностей  $\rho(\omega)$ . При увеличении размеров контакта число низкочастотных состояний заметно уменьшается, что естественно связано с увеличением доли атомов, которые по своим колебательным характеристикам близки к объемным. Понятно, что число таких атомов будет возрастать не только при увеличении размеров, но и при приближении к берегам контакта. Следовательно, наибольшее увеличение числа низкочастотных состояний достигается с уменьшением сечения контакта при увеличении расстояния между берегами.

### 6.2. Спектр электрон-фононного взаимодействия в мезоконтактах

Если проводимость микрoконтакта обусловлена наличием вырожденного электронного газа, то нелинейности вольт-амперной характеристики, вызванные слабым электрон-фононным взаимодействием, несут информацию о колебательном спектре кристаллической решетки [2–6].

Приложенное к микрoконтакту напряжение  $V$  (обычно значения  $V \approx 10\text{--}100$  мВ соответствуют ха-

рактерным энергиям фононов) создает условия для ускорения электронов, пришедших в контакт из одного массивного берега (рассматриваемого как термостат), и для замедления электронов, пришедших из противоположного берега контакта. Микрoконтактный ток переносится этими двумя группами электронов, которые лишь в малой мере обмениваются энергией между собой и с фононной системой, поскольку длина неупругой релаксации электронов  $l_\epsilon$  в микрoконтактах велика по сравнению с характерным размером контакта (например, его диаметром  $d$ ):

$$d \ll l_\epsilon, \quad (97)$$

Если размер контакта мал по сравнению с длиной упругого рассеяния электронов в проводнике, то режим переноса электронов в контакте называется баллистическим.

Неупругое электрон-фононное рассеяние дает добавку  $I^{(1)}$  к микрoконтактному току, нелинейно зависящую от приложенного напряжения  $V$ . Чтобы описать этот эффект в микрoконтактах, больших по сравнению с длиной волны де Бройля электрона, достаточно использовать систему связанных кинетических уравнений для электрон-фононной системы контакта. Рассматривая поправку для функции распределения электронов  $f_p(r)$  в первом порядке теории возмущения по интегралу электрон-фононного взаимодействия, можно найти неупругую добавку к микрoконтактному току и микрoконтактную функцию электрон-фононного взаимодействия  $G(\omega)$ , [6,143].

Спектры 1 и 2 на рис. 20 близки к микрoконтактным спектрам для длинного канала [143]. При этом различие между этими спектрами отражает эффект увеличения длины контакта. Видно, что увеличение длины перемычки приводит к заметному снижению вклада колебаний поверхностных атомов контакта, а высокочастотная область спектра почти совпадает со спектром «объемного» контакта.

Результаты расчета показывают, что в контактах в виде перемычки атомных размеров должны наблюдаться низкочастотные аномалии микрoконтактного спектра, связанные с вкладом колебательных состояний поверхности контакта (см. рис. 20). Расчеты указывают интервал размеров контакта, в котором можно ожидать проявления этого эффекта. Поперечный размер контакта не должен намного превышать десять межатомных расстояний. Длина перемычки, образующей контакт, при этом должна быть по крайней мере того же порядка, хотя наиболее четко эффект проявляется в контактах, имеющих вид удлиненной перемычки между массивными берегами. Следовательно, если поперечник контак-

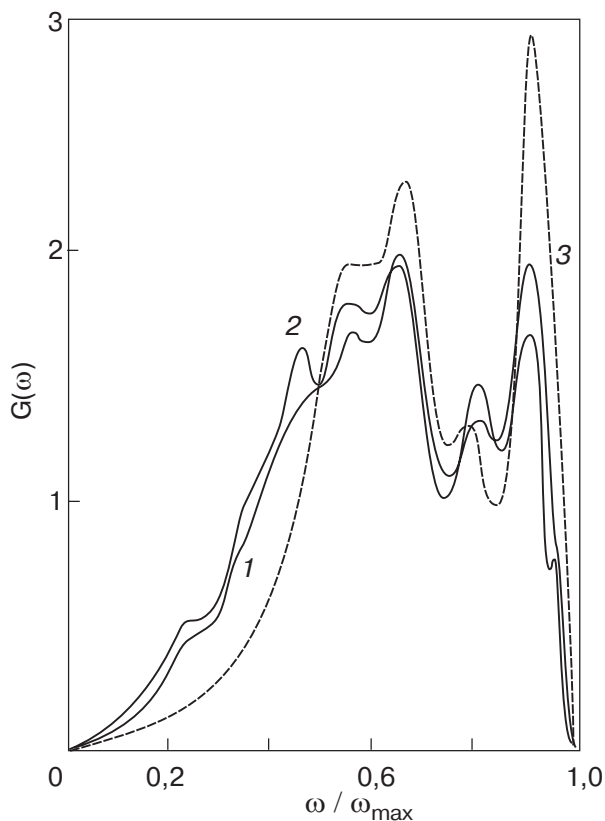


Рис. 20. Микроконтактные функции  $G(\omega)$  для микроконтактов различной длины  $l_x$  ( $l_y = l_z = 6a$ ); кривая 1 —  $l_x = 8a$ ; кривая 2 —  $l_x = La, L \gg 1$ ; кривая 3 — плотность фононных состояний неограниченного ГЦК кристалла [15] (определение микроконтактной функции электрон-фононного взаимодействия см. в работах [6,15]).

та больше десяти межатомных расстояний, то контакт можно считать «объемным».

Проведенная в работе [142] оценка модификации фононных спектров относится к случаю, когда существенным становится вклад поверхностных колебаний, причем диаметр контакта  $d$  выбирается равным по порядку глубине затухания поверхностных возбуждений  $\lambda_s$ . В работе [86] рассмотрен предельный случай ( $d \gg \lambda_s$ ), причем показано, что учет неупругого взаимодействия электронов проводимости с поверхностными колебаниями кристаллической решетки можно провести, как и в случае объемных колебаний, с помощью кинетического уравнения, в котором поверхностное рассеяние учтено с помощью граничного условия [84,85]. Форма этого граничного условия возникает в результате эффективного суммирования по приповерхностному слою толщиной  $\lambda_s$ . Вклад поверхностных колебаний в микроконтактный спектр в последнем случае оказывается малым по параметру  $\lambda_s/d$  по сравнению с вкладом объемных колебаний. Заметим, что полученное в [86] выражение для  $K$ -фактора поверхност-

ных колебаний практически совпадает с аналогичной величиной для объемных колебаний в случае контакта в виде канала.

### Заключение

В настоящем обзоре рассмотрена проблема эффективного отвода тепла с помощью микроконтактов. Как показывают многочисленные измерения низкотемпературной ( $T \leq 30$  К) фононной теплопроводности механических (прижимных) контактов между твердыми телами [16–18,66–72], режим баллистического транспорта фононов вовсе не является экзотикой даже при использовании макроскопических образцов. Известно, что в механических контактах реальная площадь контакта составляет 1–2% от номинальной площади соприкосновения сред [18]. В области низких температур макроскопический контакт приходится рассматривать как очень большое число параллельных точечных контактов. В такой системе, в отличие от единичного точечного контакта, невозможно поддерживать существенный перепад температур (скачок Капицы) между массивными берегами контакта. Однако в этом случае можно ввести теплосопrotivление контакта  $R_T$  (см. разд. 2.3), которое, согласно (7), оказывается пропорциональным  $T^{-3}$ . Такая температурная зависимость теплосопrotivления макроскопического контакта служит критерием реализации баллистического фононного транспорта в отдельных точечных контактах.

Проблема фононного транспорта актуальна и в квазинизкоразмерных системах (в том числе в ВТСП). Следует отметить, что каков бы ни был механизм сверхпроводимости в ВТСП, роль фононов в таких системах является определяющей [144,145], что еще раз подчеркивает необходимость исследования фононных свойств слоистых систем. Так, например, в настоящее время на базе слоистых структур разрабатываются новые магнитные материалы [146,147], которые могут быть использованы для увеличения плотности магнитной записи и создания квантовых компьютеров. При этом для таких систем важно изучать термодинамические характеристики, включая теплоемкость, обусловленные фононами, поскольку корректное выделение решеточного вклада является необходимым для дальнейшего учета вклада других возбуждений (в частности, магнитных).

Отметим также, что кроме квазинизкоразмерных соединений, представляют интерес структуры с так называемой дробной размерностью, содержащие включения, имеющие фрактальную геометрию [148]. В процессе теплопередачи в таких системах

эффект фрактон-фононного взаимодействия может давать существенный вклад [149].

В настоящее время проводятся исследования теплообмена между двумя средами (посредством микроструктур) при наличии контролируемого состава и количества промежуточных слоев в развитии результатов работ [150,151]. Это позволит определить динамические константы связи слоев с берегами контакта.

Экспериментальные результаты и теоретические модели, рассмотренные в данном обзоре, относятся к широкому кругу актуальных проблем, связанных с квантовым транспортом в баллистическом режиме, и в условиях, когда нужно учитывать различные механизмы рассеяния [152]. Ранее при описании электронной системы рассматривался квантовый транспорт заряда [153,154] и тепла [97] в контактах. Однако в настоящее время ясно, что квантовый транспорт тепла, вне зависимости от природы носителей, может быть описан в рамках общего формализма переноса тепла, энтропии и информации [155,156]. Универсальные свойства транспорта тепла, не зависящие от статистики носителей, были продемонстрированы в работе [157]. В последние годы прошлого века развитие техники нанолитографии дало возможность воспроизвести экспериментальную схему с подвешенным резервуаром фононов, используя длинные диэлектрические микроструктуры с контролируемой геометрией [21,158]. Стало ясно, что при понижении диаметров микроструктур до десятков нанометров в низкотемпературную фононную теплопроводность таких систем будут давать определяющий вклад эффекты квантования. Впервые эффект квантового транспорта фононов был зафиксирован с помощью прижимных 3D-контактов Si-Cu [10], вскоре это явление было исследовано в экспериментах на длинных полупроводниковых микроструктурах [23,24]. Благодаря эффекту включения оптических мод интерпретация экспериментальных данных о низкотемпературной теплопроводности таких контактов требует тщательного анализа законов дисперсии для 2D-структур [159,160]. Другой важной проблемой является учет квантовых эффектов, связанных с рассеянием на несовершенных стенках длинных каналов [161].

В настоящее время фононный транспорт в точечных контактах и микроструктурах все чаще становится предметом исследований, опирающихся на современное развитие различных вариантов нанотехнологии [162–168]. Так, стали возможны эксперименты по изучению теплопроводности отдельных углеродных нанотрубок [169,170]. В последнее время теплопроводящие микроструктуры рассматриваются не только как объекты экспериментирования,

но и как элементы проектируемых наноприборов [171–174].

Часть авторов (А.Ф., Е.С.С. и А.Г.Ш.) проводили исследования в Кошице в Университете им. Шафарика (Словакия) в рамках выполнения проектов APVT-20-009902 и APVT-20-005204. Грант №1(0430)03.

Авторы выражают благодарность Л.А. Пастуру за полезные обсуждения и поддержку.

Один из авторов (А.Ш.) посвящает свою долю труда чл.-корр. НАНУ Игорю Орестовичу Кулику, своему первому учителю в области теоретической физики, в связи с его семидесятилетием.

1. Ю.В. Шарвин, *ЖЭТФ* **48**, 984 (1965).
2. И.К. Янсон, *ЖЭТФ* **66**, 1035 (1974).
3. И.К. Янсон, *ФНТ* **9**, 676 (1983).
4. И.К. Янсон, О.И. Шкляревский, *ФНТ* **12**, 899 (1986).
5. И.К. Янсон, А.В. Хоткевич, *Атлас микроструктурных спектров электрон-фононного взаимодействия в металлах*, Наукова думка, Киев (1986).
6. И.О. Кулик, А.Н. Омелянчук, Р.И. Шехтер, *ФНТ* **3**, 1543 (1977).
7. О.И. Шкляревский, А.Г.М. Янсен, П. Видер, *ФНТ* **12**, 947 (1986).
8. P. Stefanyi, A. Feher, and A. Orendachova, *Phys. Lett.* **A143**, 259 (1990).
9. П. Штефани, А. Ферер, А.Г. Шкорбатов, *ФНТ* **18**, 153 (1992).
10. A. G. Shkorbatov, A. Feher, and P. Stefanyi, *Physica* **B218**, 242 (1996).
11. Э.Н. Богачек, И.О. Кулик, А.Н. Омелянчук, А.Г. Шкорбатов, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 519 (1985).
12. Э.Н. Богачек, А.Г. Шкорбатов, *ФНТ* **11**, 643 (1985).
13. Э.Н. Богачек, И.О. Кулик, А.Г. Шкорбатов, *ФНТ* **11**, 1189 (1985).
14. А.Г. Шкорбатов, А. Ферер, П. Штефани, Т.З. Саркисянц, *ФНТ* **19**, 1240 (1993).
15. I.A. Gospodarev, E.S. Syrkin, S.B. Feodos'ev, and A.G. Shkorbatov, *Surface Investigation* **13**, 1419 (1998).
16. R. Berman, *Thermal Conduction in Solids*, Clarendon Press, Oxford (1976).
17. E.T. Swartz and R.O. Pohl, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 605 (1989).
18. E. Gmelin, M. Asen-Palmer, M. Reuther, and R. Villar, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **32**, R19 (1999).
19. M.A. Stroschio, and M. Dutta, *Phonons in Nanostructures*, Cambridge University Press (2001).
20. E.K. Kalinin, G.A. Dreitser, I.Z. Kopp, and A.S. Myakochin, *Efficient Surfaces for Heat Exchangers. Fundamentals and Design*, Begell House Publ., New York (2001).
21. D.G. Gahil, W.K. Ford, K.E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin, and S.R. Phillpot, *Appl. Phys. Rev.* **93**, 793 (2003).

22. G. Chen and A. Shakouri, *J. Heat Transfer* **124**, 242 (2002).
23. K. Schwab, E. Henriksen, J. Worlock, and M. Roukes, *Nature* **404**, 974 (2000).
24. K. Schwab, J.L. Arlett, J. Worlock, and M. Roukes, *Physica* **E9**, 60 (2001).
25. Q. Zheng, G. Su, J. Wang, and H. Guo, *Eur. Phys. J.* **B25**, 233 (2002).
26. D.E. Angelescu, M.C. Cross, and M.L. Roukes, *Superlattices and Microstructures* **23**, 673 (1998).
27. L.G.C. Rego and G. Kirczenov, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 232 (1998).
28. M.P. Blencowe, *Phys. Rev.* **B59**, 4992 (1999).
29. A. Buldum, S. Ciraci, and C.Y. Fong, *J. Phys.: Cond. Matter* **12**, 3349 (2000).
30. A.M. Duif, A.G.M. Jansen, and P. Wyder, *J. Phys.: Cond. Matter* **1**, 3157 (1989).
31. A.G.M. Jansen, F.M. Mueller, and P. Wyder, *Phys. Rev.* **B16**, 1325 (1977).
32. U. Gerlach-Meyer and H.J. Queisser, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1904 (1983).
33. L. Weber, E. Gmelin, and H.J. Queisser, *Phys. Rev.* **B40**, 1244 (1989).
34. C.J. Muller, J.M. van Ruitenbeek, and L.J. de Jongh, *Physica* **C191**, 485 (1992).
35. Г. Ван Кемпен, О.И. Шкляревский, *ФНТ* **19**, 816 (1993).
36. A.G. Shkorbatov, P. Stefanyi, E. Bystrenova, and A. Feher, *J. Phys.: Cond. Matt.* **10**, 8313 (1998).
37. A. Feher, P. Stefanyi, R. Zaboј, and A.G. Shkorbatov, in: *Phonon Scattering in Condensed Matter VII*, M. Meissner and R.O. Pohl (eds.), Springer-Verlag, Berlin (1993), p. 143.
38. A. Feher, P. Stefanyi, R. Zaboј, A.G. Shkorbatov, and T.Z. Sarkisyantz, *Fiz. Nizk. Temp.* **18**, 542 (1992).
39. L. Koestler, S. Wurdack, W. Dietsche, and H. Kinder, in: *Phonon Scattering in Condensed Matter V*, M. Meissner and R.O. Pohl (eds.), Springer, Berlin (1986), p. 171.
40. E.S. Syркин, T.Z. Sarkisyants, and A.G. Shkorbatov, *J. Phys.: Cond. Matt.* **5**, 5059 (1993).
41. O. Weis, in: *Phonon Scattering in Condensed Matter*, W. Eisenmenger, K. Lassman, and S. Dottinger (eds.), Springer, Berlin (1984), p. 179.
42. W.A. Little, *Can. J. Phys.* **18**, 334 (1959).
43. D.A. Young and H.J. Maris, *Phys. Rev.* **B40**, 3685 (1989).
44. И.М. Халатников, *ЖЭТФ* **22**, 687 (1952).
45. И.М. Халатников, *Теория сверхтекучести*, Наука, Москва (1971).
46. П.Л. Капица, *ЖЭТФ* **11**, 1 (1941).
47. Yu.V. Sharvin, *Sov. Phys. JETP* **21**, 655 (1965).
48. Н. Винер, Р. Пэли, *Преобразования Фурье в комплексной плоскости*, Наука, Москва (1964).
49. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **26**, 551 (1954).
50. И.О. Кулик, *ФНТ* **11**, 937 (1985).
51. И.Ф. Ицкович, И.О. Кулик, Р.И. Шехтер, *ФНТ* **11**, 886 (1985).
52. И.Ф. Ицкович, Р.И. Шехтер, *ФНТ* **11**, 1176 (1985).
53. А.Г. Шкорбатов, Т.З. Саркисянц, *ФНТ* **15**, 733 (1989).
54. Ю.Г. Найдюк, Н.Н. Грибов, О.И. Шкляревский, *ФНТ* **11**, 1053 (1985).
55. Ю.Г. Найдюк, И.К. Янсон, *ФТТ* **30**, 1535 (1988).
56. V.L. Gurevich, *Transport in Phonon Systems*, North-Holland Publ. House, Amsterdam (1986).
57. С.М. Рытов, Ю.А. Кравцов, В.И. Татарский, *Введение в статистическую радиофизику*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
58. С.М. Рытов, Ю.А. Кравцов, В.И. Татарский, *Введение в статистическую радиофизику*, ч. 2, Наука, Москва (1978).
59. D. Walton, *Bull. Am. Phys. Soc.* **10**, 435 (1965).
60. Y.M. Worlock, *Phys. Rev.* **147**, 636 (1966).
61. J.W. Schwartz and C.T. Walker, *Phys. Rev.* **155**, 959 (1967).
62. Г. ван де Хюлст, *Рассеяние света малыми частицами*, Изд-во иностр. лит., Москва (1961).
63. V.C. Anderson, *J. Acoust. Soc. Am.* **22**, 426 (1950).
64. R.D. Spence and S. Granger, *J. Acoust. Soc. Am.* **23**, 701 (1951).
65. R.M. White, *J. Acoust. Soc. Am.* **22**, 426 (1950).
66. O. Weis, *Z. Angew. Phys.* **26**, 325 (1969).
67. O.V. Lounasmaa, *Experimental Principles and Methods Below 1 K*, New York, Academic (1974).
68. R.O. Pohl, in: *Phonon Scattering in Solids*, L.J. Challis, V.W. Rampton, and A.F.G. Wyatt (eds.) Plenum, New York (1976), p. 107.
69. J.A. Katenberg, C.L. Reynolds, and A.C. Anderson, *Phys. Rev.* **B16**, 673 (1977).
70. D.S. Matsumoto, C.L. Reynolds Jr., and A.C. Anderson, *Phys. Rev.* **B16**, 3303 (1977).
71. F. Pobell, *Matter and Methods at Low Temperatures*, Heidelberg, Springer (1992).
72. M.N. Wyborne, and J.K. Wigmore, *Rep. Progr. Phys.* **51**, 923 (1988).
73. А.Г. Шкорбатов, Т.З. Саркисянц, *ФНТ* **16**, 725 (1990).
74. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
75. Р.Н. Гуржи, А.О. Максимов, *ФНТ* **3**, 356 (1977).
76. Р.Н. Гуржи, *УФН* **94**, 689 (1968).
77. R.C. Zeller and R.O. Pohl, *Phys. Rev.* **B4**, 2029 (1971).
78. W.A. Little, *Phys. Rev.* **123**, 435 (1961).
79. А.Ф. Андреев, *ЖЭТФ* **43**, 1535 (1962).
80. R.E. Peterson and A.S. Anderson, *J. Low Temp. Phys.* **11**, 639 (1973).
81. E.T. Swartz and R.O. Pohl, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 605 (1989).
82. И.О. Кулик, А.Г. Шкорбатов, *ФНТ* **19**, 895 (1993).
83. Э.Н. Богачек, А.Г. Шкорбатов, И.О. Кулик, *ФНТ* **15**, 278 (1989).
84. Л.А. Фальковский, *ЖЭТФ* **76**, 1358 (1979).
85. Ю.А. Колесниченко, Р.И. Шехтер, *ФНТ* **15**, 959 (1989).
86. Ю.А. Колесниченко, Р.И. Шехтер, *Поверхность* **8**, 49 (1990).



87. И.О. Кулик, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 302 (1985).
88. И.О. Кулик, *ФНТ* **11**, 937 (1985).
89. R. Landauer, *Z. Phys.* **B68**, 217 (1987).
90. Y. Imry, *Directions in Condensed Matter Physics*, G. Grinstein, and G. Mazenko (eds.), World Scientific, Singapore (1986).
91. Ф.И. Федоров, *Теория упругих волн в кристаллах*, Наука, Москва (1965).
92. А.М. Заголкин, И.О. Кулик, *ФНТ* **16**, 911 (1990).
93. Е. Скучик, *Основы акустики*, т.1, Мир, Москва (1965).
94. R.J. Rubin and W.I. Greer, *J. Math. Phys.* **12**, 1686 (1971).
95. A. Casher and J. Lebowitz, *J. Math. Phys.* **12**, 1703 (1971).
96. A. O'Connor and J. Lebowitz, *J. Math. Phys.* **15**, 692 (1974).
97. H.L. Engquist and P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **B24**, 1151 (1981).
98. B.J. van Wees, H. van Houten, C.W.J. Beenakker, G. Williamson, L.P. Kouwenhoven, D. van Marel, and C.T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848 (1988).
99. D.A. Wharam, T.J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J.E.F. Frost, D.G. Hasko, D.C. Peacock, D.A. Ritchie, and G.A. Jones, *J. Phys.* **C21**, L209 (1988); *ibid.* **C22**, L887 (1988).
100. W.E. Bron, *Rep. Prog. Phys.* **43**, 302 (1980).
101. M.N. Wyborne and J.K. Wigmore, *Rep. Prog. Phys.* **51**, 923 (1988).
102. A.D. Stone and H. Bruus, *Physica* **B189**, 43 (1993).
103. P.M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, Mc-Graw-Hill, New York (1953).
104. Е. Скучик, *Основы акустики*, т. 2, Мир, Москва (1965).
105. C.J. Bouwkamp, *Theoretische en Numerieke Behandelung van de Buiging Door Een Ronde Opening*, Dissertation, University of Groningen (1941).
106. H. Levine and J. Schwinger, *Phys. Rev.* **74**, 958 (1948).
107. H. Levine and J. Schwinger, *Phys. Rev.* **75**, 1423 (1949).
108. И.Ф. Ицкович, Р.И. Шехтер, *ФНТ* **11**, 373 (1985).
109. J.A. Torres, J.I. Pascual, and J.J. Saenz, *Phys Rev.* **B49**, 16581 (1994).
110. Л.И. Глазман, Г.Б. Лесовик, Д.Е. Хмельницкий, Р.И. Шехтер, *Письма в ЖЭТФ* **48**, 218 (1988).
111. И.Б. Левинсон, *Письма в ЖЭТФ* **48**, 273 (1988).
112. E.G. Naanappel and D. van Marel, *Phys. Rev.* **B39**, 5484 (1989).
113. E.A. Montie, E.C. Cosman, G.W. 't Hooft, M.B. van der Mark, and C.W.J. Beenakker, *Nature* **350**, 594 (1991).
114. A.G. Scherbakov, E.N. Bogachek, and U. Landman, *Phys Rev.* **B53**, 4054 (1996).
115. J.A. Torres and J.J. Saenz, *Physica* **B218**, 234 (1996).
116. И.М. Гельфгат, Е.С. Сыркин *ФНТ* **4**, 141 (1978).
117. Е.С. Сыркин, И.М. Гельфгат *ФНТ* **12**, 525 (1986).
118. G.L. Pollack, *Rev. Mod. Phys.* **41**, 48 (1969).
119. C. Anderson and W.L. Johnson, *J. Low. Temp. Phys.* **7**, 1 (1972).
120. J.C.A. van der Sluijs, E.A. Jones, and A.E. Alnaimi, *Cryogenics* **14**, 95 (1974).
121. J. Weber, W. Sandman, W. Dietsche, and H. Kinder, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 1469 (1978).
122. А.Ф. Андреев, Ю.А. Косевич, *ЖЭТФ* **81**, 1435 (1981).
123. Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин, *Кристаллография* **33**, 1339 (1988).
124. Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин, *Кристаллография* **33**, 1347 (1988).
125. Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин, *ФТТ* **33**, 2053 (1991).
126. Yu.A. Kosevich, and E.S. Syrkin, *Phys. Rev.* **B43**, 323 (1991).
127. A. Kosevich, *Prog. Surf. Sci.* **55**, 1 (1997).
128. Doo-In Kim, Hyo-Sopk Ahn, and Dong-Hoon Choi, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1919 (2004).
129. Moon-Bong Song, Jai-Man Jang, and Chi-Woo Lee, *Bull. Korean Chem. Soc.* **23**, 71 (2002).
130. D.A. Grigg, P.E. Russel, and J.E. Griffin, *J. Vac. Sci. Technol.* **A10**, 680 (1992).
131. M. Heim, R. Eschrich, A. Hillebrand, H.F. Knapp, R. Guckenberger, and G. Cevc, *J. Vac. Sci. Technol.* **B14**, 1998 (1996).
132. E.S. Syrkin, A.G. Shkorbatov, and A. Feher, in: *Phonon Scattering in Condensed Matter VII*, M. Meissner and R.O. Pohl (eds.), Springer-Verlag, Berlin (1993), p. 421.
133. J.M. Krans, C.J. Muller, I.K. Yanson, et al., *Phys. Rev.* **B48**, 14721 (1993).
134. C.J. Muller, J.M. van Ruitenbeek, C.W.J. Beenakker, and R. de Brujn Ouboter, *Physica* **B189**, 225 (1993).
135. Дж. Займан, *Модели беспорядка*, Мир, Москва (1982).
136. Д.М. Берча, М.Н. Ботвинко, Л.Ю. Германская, М.А. Иванов, *ФНТ* **12**, 287 (1986).
137. Р. Книрр, *Phys. Rev.* **B43**, 6908 (1991).
138. В.И. Пересада, *Физика конденсированного состояния*, Физ.-техн. ин-т низких температур АН УССР, Харьков (1968).
139. В.И. Пересада, В.Н. Афанасьев, В.С. Боровиков *ФНТ* **1**, 461 (1975).
140. R. Haydock, in: *Solid State Physics*, H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (eds.), Academic Press (1980), p. 216.
141. А.М. Косевич, Е.С. Сыркин, and S.B. Feodosyev, *Phys. Lett.* **A167**, 94 (1992).
142. И.А. Господарев, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, А.Г. Шкорбагов, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **11**, 64 (1999).
143. И.О. Кулик, Р.И. Шехтер, А.Г. Шкорбагов, *ЖЭТФ* **81**, 2126 (1981).
144. В.Л. Гинзбург, *УФН* **174**, 1240 (2004).
145. Е.Г. Максимов, *УФН* **170**, 1033 (2000).
146. A. Orendacova, M. Orendac, V. Bondarenko, A. Feher, and A.G. Anders, *J. Phys.: Cond. Matter* **10**, 1125 (1998).

147. M. Orendac, S. Zvyagin, A. Orendacova, M. Sieling, B. Luthi, A. Feher, and M.M. Meisel, *Phys. Rev.* **B60**, 4170 (1999).
148. A. Dulfan, *Functional Materials* **9**, 559 (2002).
149. R. Orbach, *Science* **231**, 814 (1986).
150. E.S. Syrkin, A.G. Shkorbatov, P.A. Minaev, and A. Feher, *Phys. Status Solidi* **C1**, 2975 (2004).
151. E.S. Syrkin, P.A. Minaev, A.G. Shkorbatov, and A. Feher, *Microelectronic Engineering* **81**, 503 (2005).
152. I.M. Lifshits, S.A. Gredeskul, L.A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, John Wiley and Sons, New York (1988).
153. R. Landauer, *Phys. Rev.* **82**, 80 (1951).
154. R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957).
155. J.B. Pendry, *J. Phys.* **A16**, 2161 (1983).
156. M.P. Blencowe and V. Vitelli, *Phys. Rev.* **A62**, 52104 (2000).
157. L.G.C. Rego and G. Kirczenow, *Phys. Rev.* **B59**, 13080 (1999).
158. T.S. Tighe, J.M. Worlock, and M.L. Roukes, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2687 (1997).
159. N. Nishiguchi, Y. Ando, and M.N. Wybourne, *J. Phys. Cond. Matter* **9**, 5751(1997).
160. M.C. Cross and R. Lifshitz, *Phys. Rev.* **B64**, 085324 (2001).
161. D.H. Santamore and M.C. Cross, *Phys. Rev.* **B63**, 4306 (2001).
162. M.A. Strosio, V. Dutta, D. Kahn, and K.W. Kim, *Superlatt. Microstruct.* **29**, 405 (2001).
163. L. Shi and A. Majumdar, *J. Heat Transfer* **124**, 329 (2002).
164. W. Wang and X. Yi, *Chin. J. Phys.* **41**, 92 (2003).
165. D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi, P. Yang, and A. Majumdar, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2934 (2003).
166. Y. Tanaka, F. Yoshuda, S. Tamura, *Phys. Status Solidi* **C1**, 2625 (2004).
167. V.A. Margulis and A.V. Shorokhov, *Phys. Status Solidi* **C1**, 2642 (2004).
168. S. Mizuno and O. Tokuda, *Phys. Status Solidi* **C1**, 2729 (2004).
169. P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, and P.L. McEuen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 215502 (2001).
170. P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, and P.L. McEuen, *Physica* **B323**, 67 (2002).
171. O. Kwon, L. Shi, and A. Majumdar, *J. Heat Transfer* **125**, 156 (2003).
172. L. Shi and A. Majumdar, in: *Applied Scanning Probe Methods*, H. Fuchs, S. Hosaka, and B. Bhushan (eds.), Springer (2003), p. 27.
173. L. Shi, in: *Microscopy for Nanotechnology*, N. Yao and Z.L. Wang (eds.), Kluwer Academic Publisher (2005), p.183.
174. C. Yu, J. Vykoukal, D. Vykoukal, J. Schwartz, L. Shi, and P.R.C. Gascoyne, *J. Microelectromechanical Systems* **14**, 480 (2005).

Low temperature phonon transport through  
3D microcontacts  
(Review Article)

A. Feher, A.A. Mamaluy, A.Ya. Dulfan, E.S. Syrkin,  
and A.G. Shkorbatov

The physical mechanisms of quantum, relaxation and kinetic phenomena in 3D-point contacts (dielectric–dielectric and metal–dielectric) are reviewed. The emphasis on the description of phonon system that are modified substantially ballistic transport conditions. In such systems the energy flows are limited by the existing weak bounded layers of impurity atoms, planar defects or microscopic size contacts. Small sizes of point contacts (from several nm to 1000 nm) make it possible to investigate the low temperature heat transport and charge transfer in the scales smaller than the typical length of in elastic scattering and the wavelength of phonons. The phonon transport for crystal-crystal interface is analyzed and different modes of planar defects are considered. The peculiarities of the atomic dynamic of micro-crystals and the resonance properties of inter crystal boundary are studied. The quantum phonon heat conductivity of point contacts is considered in detail.