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

Препринты ИПМ • Препринт № 96 за 2022 г.

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

Ю.А. Волков, М.Б. Марков,
И.А. Тараканов

Статистический метод частиц для решения фононного уравнения Больцмана

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Волков Ю.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. Статистический метод частиц для решения фононного уравнения Больцмана // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 96. 16 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2022-96
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-96

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

Ю.А. Волков, М.Б. Марков, И.А. Тараканов

Статистический метод частиц для решения фононного уравнения Больцмана

Москва – 2023

Волков Ю.А., Марков М.Б., Тараканов И.А.

Статистический метод частиц для решения фононного уравнения Больцмана

Распространение тепла в кристалле рассмотрено как процесс переноса фононов – квазичастиц, обладающих квазиимпульсом и энергией. Для функции распределения фононов в фазовом пространстве построено кинетическое уравнение Больцмана. Рассеяние фононов моделируется в приближении времени релаксации их распределения к равновесному состоянию. Численный алгоритм решения кинетического уравнения основан на статистическом методе частиц, сочетающем решение уравнений движения фононов со стохастическим моделированием их рождения и уничтожения. Рассмотрены результаты численного решения задач релаксации температуры в кристалле при нагреве его поверхности и выделении энергии в объеме.

Ключевые слова: фонон, псевдотемпература, внутренняя энергия, рассеяние, поглощение, равновесие, кинетическое уравнение, функция распределения

Volkov Yu.A., Markov M.B., Tarakanov I.A.

Statistical particle method for solving the phonon Boltzmann equation

The propagation of heat in a crystal is considered as a process of transport of phonons – quasi-particles with quasi-momentum and energy. The Boltzmann kinetic equation is constructed for the phonon's distribution function in the phase space. The scattering of phonons is modeled in the approximation of the time of relaxation of their distribution to the equilibrium state. The numerical algorithm for solving the kinetic equation is based on the statistical method of particles, which combines the solution of the phonons motion equations with stochastic modeling of their creation and annihilation. The results of the numerical solution of the problems of temperature relaxation in a crystal during heating of its surface and energy release in the volume are considered.

Key words: phonon, pseudotemperature, internal energy, scattering, absorption, equilibrium, kinetic equation, distribution function

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 20-01-00419).

Оглавление

Введение 3
1 Уравнение Больцмана для фононного газа 4
2 Рождение и уничтожение фононов 6
3 Вычисление псевдотемпературы фононов 8
4 Внешний источник тепла 12
Заключение 14
Библиографический список 15

Введение

Теоретические исследования термической проводимости твердых кристаллических диэлектриков и полупроводников начались с работы Дебая [1], где он постулировал, что перенос тепла в кристалле связан с упругими делокализованными волнами в решетке. Пайерлс предположил, что упругие волны в решетке квантуются [2]. Таким образом, энергия каждой упругой волны складывается из целого числа квантов – фононов. Вместо набора упругих волн с волновыми числами $\mathbf{k}$ и частотами $\omega_\ell(\mathbf{k})$ можно рассматривать систему фононов как элементарных возбуждений [3], т.е. квазичастиц. Фононы обладают квазиимпульсом $\hbar\mathbf{k}$ и энергией $\hbar\omega_\ell(\mathbf{k})$, где ℓ – поляризация, $\hbar$ – константа Планка. В тепловом равновесии фононы распределены по формуле Планка с температурой T.

В гармоническом приближении для потенциальной энергии взаимодействия атомов в решетке фононы не взаимодействуют друг с другом, т.е. представляют собой идеальный газ. Выравнивание температуры газа и окружающей среды осуществляется через поверхность кристалла.

Если в кристалл поступает энергия, тепловое равновесие нарушается. До восстановления теплового равновесия функция распределения $f_{ph,\ell}(\omega,\mathbf{x},t)$ фононов поляризации ℓ зависит от координат $\mathbf{x}$ и времени t. Переходный процесс подчиняется уравнению Больцмана для фононного газа

$$\frac{\partial f_{ph,\ell}}{\partial t} + \mathbf{v}_{g,\ell}\frac{\partial f_{ph,\ell}}{\partial \mathbf{x}} = I[f_{ph,\ell}], \tag{1}$$

где $\mathbf{v}_{g,\ell} = \partial\omega_\ell/\partial\mathbf{k}$ – групповая скорость фононов поляризации ℓ. Правая часть уравнения (1) представляет собой оператор рассеяния, который описывает взаимодействие фононов и «возвращает» газ в равновесное состояние. Согласно [2], источником такого взаимодействия (реакции распада и слияния фононов) служит ангармоничность колебаний атомов решетки. Оператор рассеяния в (1) может иметь различную форму [4-7], но общим правилом является сохранение энергии при рассеянии:

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\hbar\omega(\mathbf{k})I\left[f_{ph}\right](\mathbf{k}) = 0. \tag{2}$$

В отсутствие внешних источников энергии, а также после прекращения их действия выполнение условия (2) должно приводить к выравниванию внутренней энергии по всему объему кристалла.

Даже при значительных упрощениях численное решение уравнения (1) требует привлечения больших вычислительных ресурсов. Для решения уравнения (1) предложены и реализованы варианты метода Монте-Карло (см. обзоры

[8], [9]). В данной работе предложена версия метода Монте-Карло, которая использует разработанный ранее статистический метод частиц для электрон-фононной подсистемы [10,11].

Уравнение (1) решается в рамках самых простых физических приближений касательно рассеяния фононов. Эти вопросы рассмотрены в разделе 2. В основном эти приближения сводятся к тому, что оператор рассеяния рассматривается в приближении времени релаксации, а поляризации фононов игнорируются. Тогда статистический метод частиц [10] можно применить для расчета динамики фононного газа. Детали алгоритма, характерные только при моделировании процессов переноса в фононном газе, рассмотрены в разделе 3. Процессы релаксации неравновесных состояний рассматриваются в разделах 3 и 4. Вводится ключевое понятие псевдотемпературы [7], служащее одним из способов описания неравновесных состояний. В частности, псевдотемпература выступает в качестве основного средства при моделировании источников тепла в объеме образца. Рассмотрена задача о восстановлении теплового равновесия при импульсном воздействии на наноразмерный объект.

1 Уравнение Больцмана для фононного газа

В приближении времени релаксации кинетическое уравнение для функции распределения фононов имеет вид [6-8], [12]:

$$\frac{\partial f_{ph}}{\partial t} + c_s \mathbf{\Omega} \frac{\partial f_{ph}}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{f_{ph} - f_0}{\tau}. \tag{3}$$

Здесь c_s – усредненная по поляризациям скорость звука, $c_s^{-3} = \sum_l c_\ell^{-3}$, единичный вектор $\mathbf{\Omega} = \mathbf{c}_s / c_s$. Так как уравнение (3) используется исключительно в связи с процессами переноса энергии, то обе части (3) следует умножить на энергию фонона $\hbar\omega$. Вместо этого примем по определению, что функция распределения фононов включает в себя множитель энергии $\hbar\omega$, т.е. $f_{ph} \to \hbar\omega f_{ph}$. Тогда в правой части (3) f_0 – равновесная функция распределения Планка

$$f_0 = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\hbar\omega / k_b T\right) - 1},$$

где k_b – постоянная Больцмана. Суммарная скорость рассеяния фононов:

$$\tau^{-1}(\omega,T) = \tau_{nla}^{-1}(\omega,T) + \tau_{nta}^{-1}(\omega,T) + \tau_{ula}^{-1}(\omega,T) + \tau_{nta}^{-1}(\omega,T) + \tau_b^{-1}. \tag{4}$$

В данной работе рассматриваются следующие процессы рассеяния:
- нормальное рассеяние на продольных акустических фононах (nla);
- нормальное рассеяние на поперечных акустических фононах (nta);

- рассеяние на продольных акустических фононах с перебросом (ula);
- рассеяние на поперечных акустических фононах с перебросом (uta).

Зависимость скорости рассеяния от температуры вещества и энергии фонона подчиняется следующим полуэмпирическим формулам [4], [13]:

$$\tau_\ell^{-1}(\omega,T) = A_\ell \omega^2 T\left(1-\exp\left[-3T/\theta\right]\right) \tag{5а}$$

для нормальных процессов и

$$\tau_\ell^{-1}(\omega,T) = A_\ell \omega^4 T\left(1-\exp\left[-3T/\theta\right]\right) \tag{5б}$$

для процессов с перебросом. Здесь θ – температура Дебая, составляющая 657 К для кремния и 360 К для германия. Значения констант приведены в [13].

Обозначим толщину слоя материала символом d. Тогда величина $\tau_b^{-1} = c_s/d$ дает скорость рассеяния фононов границей кристалла. Хотя время τ_b напрямую не связано с взаимодействием фононов друг с другом, его включение в (5) становится необходимым при уменьшении размеров объекта [12], т.е. при $d/\Lambda \le 1$, где Λ – средняя длина свободного пробега доминирующих при данной температуре фононов. В этом случае механизм рассеяния фононов на границе может преобладать над процессами рассеяния в объеме, его нельзя игнорировать.

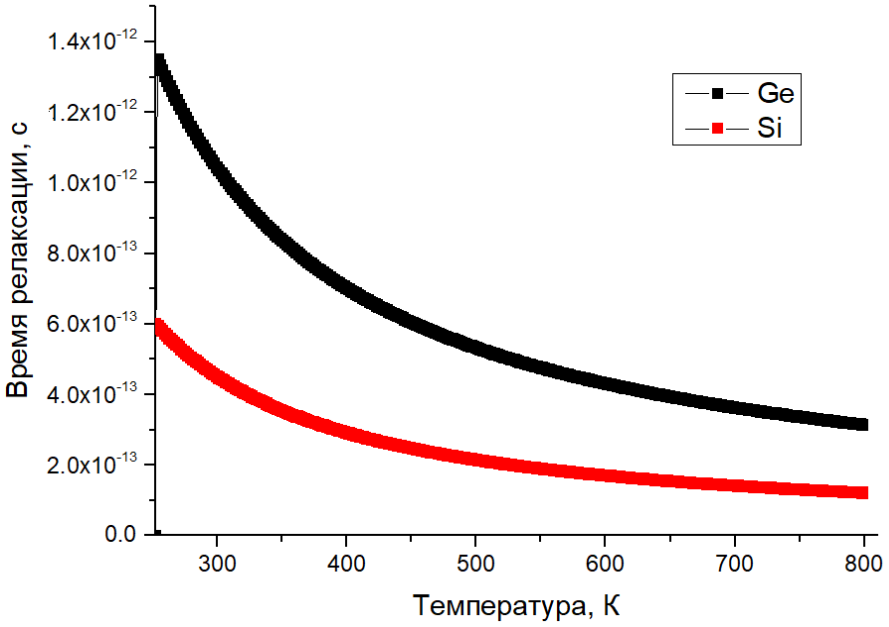

Рис. 1. Время свободного пробега фононов в зависимости от температуры вещества

Чтобы получить скорость рассеяния фононов, зависящую только от температуры, следуя [14-15], усредним времена по Росселанду, т.е. по производной функции распределения Планка по температуре

$$\tau(T)=\int_0^{\omega_D}\frac{df_0}{dT}\tau(\omega,T)D(\omega)d\omega\Big/\int_0^{\omega_D}\frac{df_0}{dT}D(\omega)d\omega, \qquad (6)$$

$$\frac{df_0}{dT}=\frac{\hbar^2\omega^2\exp\left(\hbar\omega/k_bT\right)}{k_bT^2\left(\exp\left(\hbar\omega/k_bT\right)-1\right)^2}.$$

В формуле (6) ω_D – предельная (дебаевская) частота колебаний, плотность состояний фононов полагается дебаевской $D(\omega)=3\omega^2/2\pi^2c_s^{\,3}$, что позволяет провести вычисления до конца.

Зависимость среднего времени фонон-фононного взаимодействия от температуры в кремнии и германии, вычисленная по формулам (4)-(6), представлена на рисунке 1.

2 Рождение и уничтожение фононов

Следующий шаг состоит в том, чтобы представить внутреннюю энергию вещества в виде совокупности квантов колебаний кристаллической решетки. Рассмотрим плотность внутренней энергии вещества в дебаевском пределе:

$$E=\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar\omega}{\exp\left(\hbar\omega/k_bT\right)-1}\cdot\frac{3\omega^2}{2\pi^2c_s^{\,3}}d\omega.$$

Сделаем замену переменных $y=\hbar\omega_D/k_bT=\Theta/T$, где $\Theta=\hbar\omega_D/k_b$ – дебаевская температура вещества. Тогда плотность энергии можно переписать в виде

$$E=\frac{3\left(k_bT\right)^4}{2\pi^2c_s^{\,3}\hbar^3}\int_0^{\Theta/T}\frac{y^3dy}{\exp y-1}. \qquad (7)$$

Соответственно, теплоемкость по Клеменсу и Коллоуэю равна [4],[5],[12]

$$C(T)=\frac{dE}{dT}=\frac{3k_b\left(k_bT\right)^3}{2\pi^2c_s^{\,3}\hbar^3}\int_0^{\Theta/T}\frac{y^4\exp y}{\left[\exp y-1\right]^2}dy. \qquad (8)$$

По определению дебаевская температура $\Theta=\hbar\omega_D/k_B=\left(\hbar/k_b\right)\left(6\pi^2nc_s^3\right)^{1/3}$, где n – число атомов в единице объема. Тогда формулу (8) можно переписать в виде функции, зависящей только от отношения T/Θ:

$$C(T) = 9k_b n\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{y^4 \exp y}{\left[\exp y - 1\right]^2} dy. \qquad (9)$$

Пусть сначала температура среды задана. Тогда, по формуле (7), задана плотность внутренней энергии тела. Разобьем плотность энергии по интервалам $\left[E_n, E_{n+1}\right]$, которые соответствуют энергиям фононов $\left[\hbar\omega_n, \hbar\omega_{n+1}\right]$. Энергия каждого интервала будет равна

$$\Delta E_n = \frac{3\left(k_b T\right)^4}{2\pi^2 c_s{}^3 \hbar^3} \int_{\hbar\omega_n/k_b T}^{\hbar\omega_{n+1}/k_b T} \frac{y^3 dy}{\exp y - 1}.$$

Вероятность появления фонона с частотой $\hbar\tilde{\omega}_n$ равна $p_n = \Delta E_n / E$, где $\hbar\tilde{\omega}_n \in \left[\hbar\omega_n, \hbar\omega_{n+1}\right]$.

Разобьем весь объем образца на разностные ячейки и обозначим их индексами ijk. В каждой ячейке генерируются N фононов. Число N кратно количеству интервалов в разбиении плотности энергии. Внутри каждого интервала $\left[E_n, E_{n+1}\right]$ припишем фонону энергию $\hbar\tilde{\omega}_n = 0.5\left(\hbar\omega_n + \hbar\omega_{n+1}\right)$. Тогда вес фонона с энергией $\hbar\tilde{\omega}_n$ будет равен $w_n = E_n \Delta V \big/ \hbar\tilde{\omega}_n$, где ΔV – объем ячейки. Без ограничения общности можно считать объем ячеек одинаковым. Угловое распределение фононов при рождении изотропно, скорость фононов равна скорости звука в веществе c_s. Точка рождения фонона случайным образом распределена по объему ячейки.

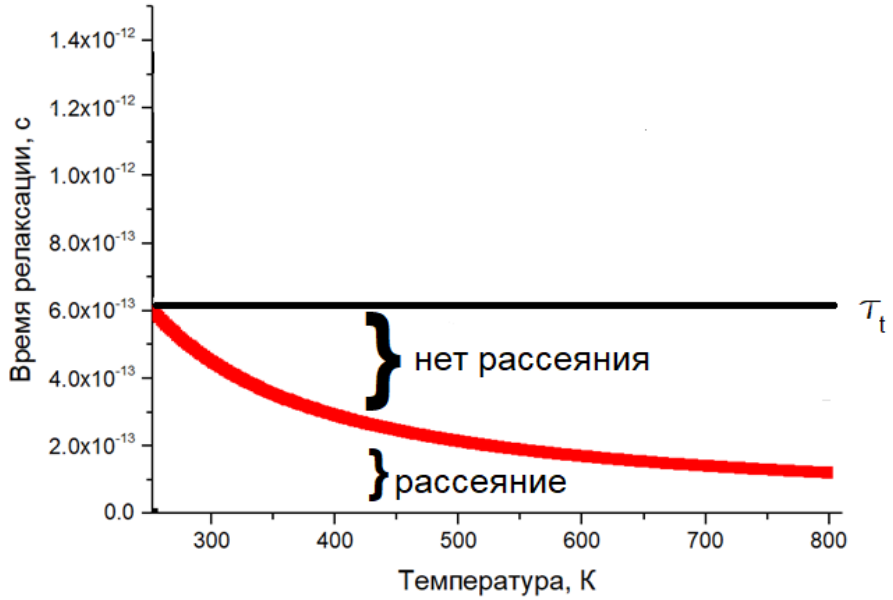

Рис. 2. Выбор суммарной скорости рассеяния

Время свободного пробега фонона Δt разыгрывается по стандартной формуле $\Delta t = \tau_t \ln \xi$, где ξ – равномерно распределенные на отрезке $[0,1]$ случайные числа. Известно из [16], [17], что данная формула справедлива, если время τ_t постоянно. Для этого используется метод фиктивного рассеяния, т.е. рассеяния, не приводящего к изменению состояния частицы. Выбор τ_t показан на рисунке 2.

При рассеянии фонон не меняет своей энергии. Однако направление его движения меняется случайным образом. Это означает, что в точке рассеяния родился такой же фонон с произвольно направленной скоростью звука c_s. Время рассеяния границей не фигурирует при розыгрыше среднего времени свободного пробега, так как все пересечения границ отслеживаются отдельно. Используются два основных типа рассеяния на границе объекта: упругое и диффузное отражения. Другие возможные процессы, не связанные непосредственно с фонон-фононным взаимодействием, показаны на рисунке 3.

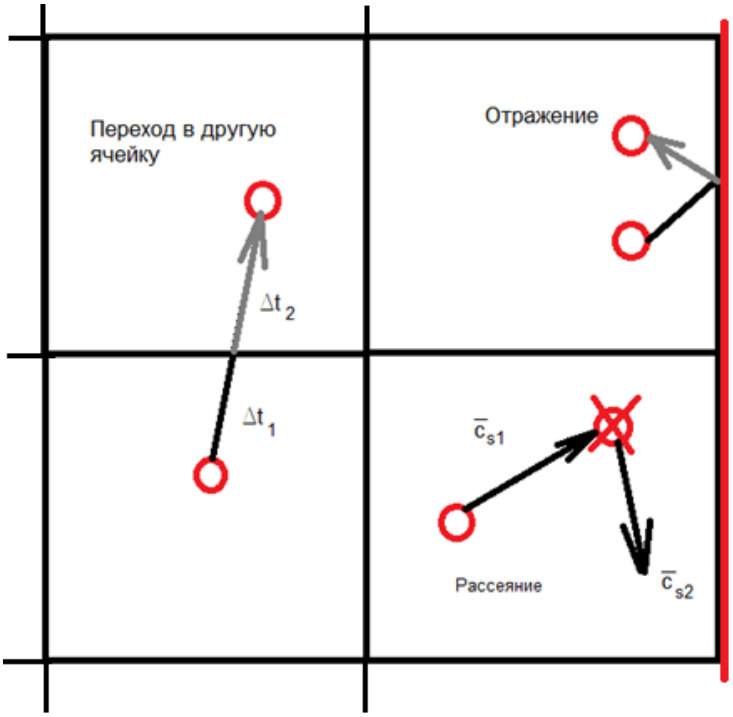

Рис. 3. Процессы, происходящие с фононами

3 Вычисление псевдотемпературы фононов

Применим к оператору рассеяния в приближении времени релаксации формулу (2). В результате получим, что f_{ph} и f_0 связаны интегральным соотношением

$$\int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega f_{ph}}{\tau(\omega)} D(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega f_0(T_p)}{\tau(\omega)} D(\omega) d\omega . \qquad (10)$$

Формула (10) неявно определяет локальную псевдотемпературу T_p [8], которая, вообще говоря, зависит от точки пространства и времени. Подставляя в (10) вместо $\tau(\omega)$ усредненные по Росселанду времена рассеяния и учитывая, что

$$E = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega f_{ph} D(\omega) d\omega,$$

снова приходим к формуле (7). Выделим пространственную ячейку с индексами ijk. Формула (7) принимает вид

$$E_{ijk} = \frac{3\left(k_b T_{p,ijk}\right)^4}{2\pi^2 c_s^3 \hbar^3} \int_0^{\Theta/T_{p,ijk}} \frac{y^3 dy}{\exp y - 1}. \qquad (11)$$

Отличие от (7) состоит в том, что теперь в левой части (11) стоит уже известная плотность энергии, а в правой части (11) – неизвестная локальная псевдотемпература $T_{p,ijk}$. Уравнение (11) однозначно разрешимо относительно $T_{p,ijk}$, т.к. плотность внутренней энергии и теплоемкость вещества являются монотонно растущими функциями температуры. При изменении плотности энергии в ячейке, например от E_1 до E_2, псевдотемпература изменяется от T_1 до T_2 (рисунок 4).

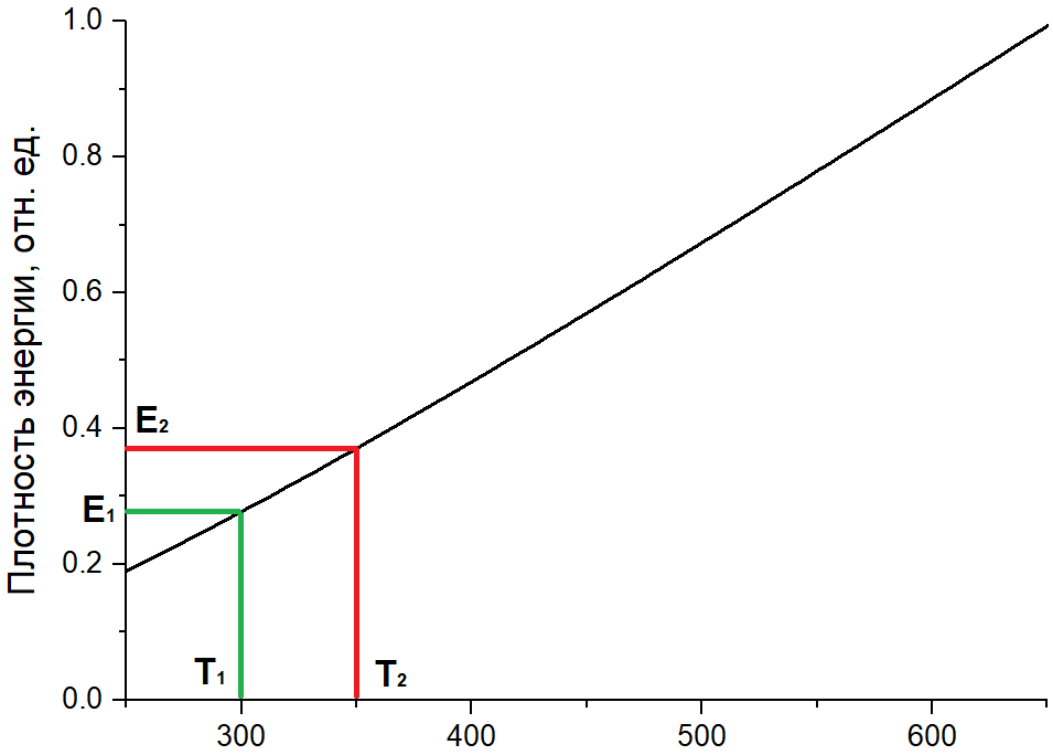

Рис. 4. Вычисление псевдотемпературы в ячейке

Выберем шаг по времени Δt, одинаковый для всех фононов. Пусть в момент времени t известны все тепловые характеристики во всех ячейках. Тогда в момент времени $t+\Delta t$ плотность энергии ячейке ijk

$$E_{ijk}(t+\Delta t)=E_{ijk}(t)+\left(1/\Delta V\right)\sum_{m} s_m \tilde{\hbar}\omega_m w_m, \qquad (12)$$

где $s=-1$ соответствует уходу фонона из ячейки, а $s=1$ приходу фонона в ячейку ijk. Далее используется уравнение (11) для вычисления $T_{p,ijk}(t+\Delta t)$.

Рассмотрим применение алгоритма для моделирования нагрева одной из стенок однородного кремниевого образца. Стенка нагревается до 600 К. Образец имеет форму куба со стороной 200 нм, начальная температура кремния составляет 300 К. На образец наложена разностная сетка 20x20x20.

На рисунке 5 показаны зависимости температуры от координаты x в направлении нормали к нагретой стенке образца для последовательных моментов времени. Красный цвет соответствует 0.01 нс с момента начала расчета, оранжевый – 0.05 нс, зеленый – 0.1 нс, синий – 0.6. Видно, что за время порядка 0.5 нс в образце устанавливается тепловое равновесие. Энергия перераспределяется, и температура устанавливается на уровне порядка 315 К.

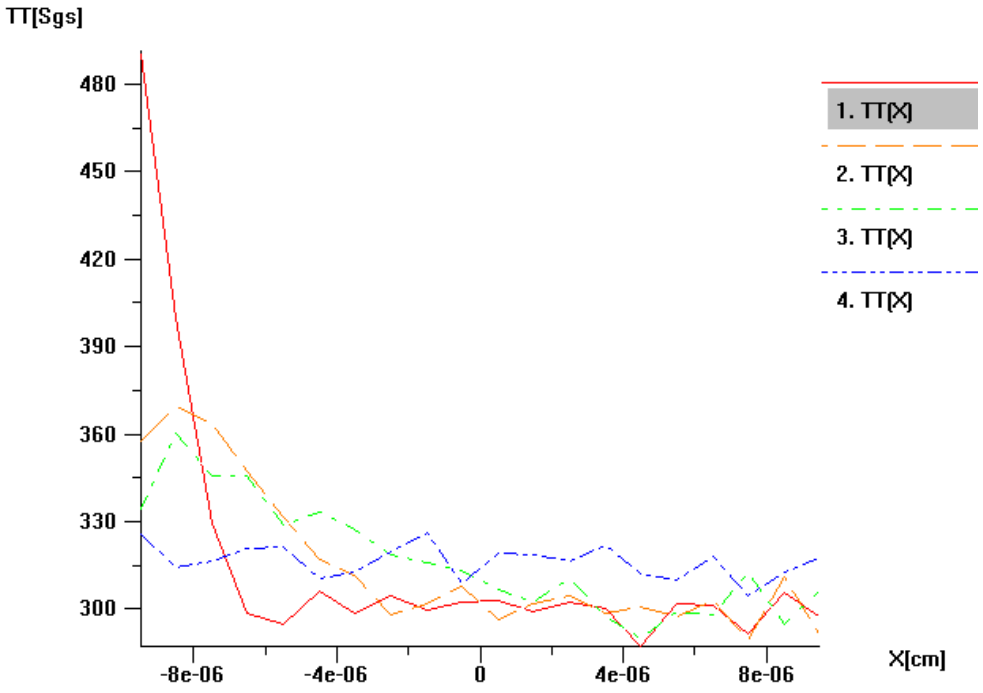

Рис. 5. Зависимости температуры от координаты x для разных моментов времени (нагрев до 600 К)

Рассмотрим задачу нагрева стенки того же образца до температуры 350 К. В этом расчете генерировалось 1000 частиц в каждой ячейке. На рисунке 6 показаны зависимости температуры от координаты x. Красный цвет соответствует

0.01 нс с момента начала расчета, оранжевый – 0.03 нс, зеленый – 0.05 нс с момента начала расчета, синий – 0.2 нс.

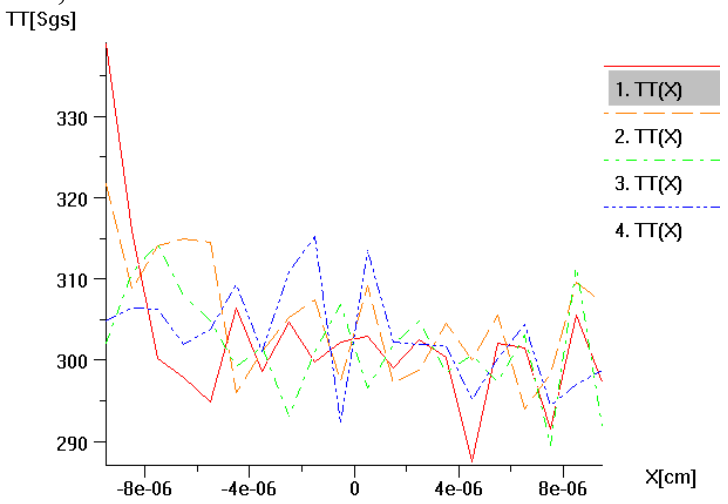

Рис. 6. Зависимости температуры от координаты *x* для разных моментов времени (нагрев до 350 К, 1000 частиц в ячейке)

Видно, что за время порядка 0.2 нс температура в образце выравнивается. Но флуктуации температуры составляют порядка 20 К при первоначальном нагреве образца на 50 К. Эта ошибка связана с недостаточным количеством частиц в расчете. При генерации по 10000 частиц в ячейке результаты становятся более гладкими и физичными. На рисунке 7 показаны зависимости температуры от координаты *x*. Красный цвет соответствует 0.01 нс с начала расчета, оранжевый – 0.03 нс, зеленый – 0.05 нс, синий – 0.2 нс, черный – 0.7 нс. Видно, что за время порядка 0.2 нс температура в образце не успевает выравниваться, но за время 0.7 нс с начала расчета температура устанавливается на уровне 304 К.

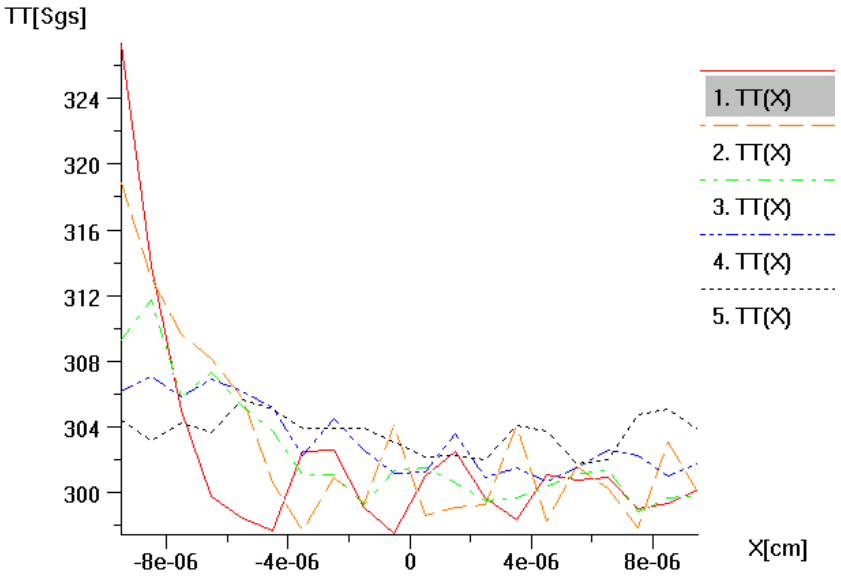

Рис. 7. Зависимости температуры от координаты *x* для разных моментов времени (нагрев до 350 К, 10000 частиц в ячейке)

4 Внешний источник тепла

Рассмотрим кинетику фононов под действием объемного источника энерговыделения. Кинетическое уравнение для фононов в этом случае неоднородно:

$$\frac{\partial f_{ph}}{\partial t} + c_s \mathbf{\Omega} \frac{\partial f_{ph}}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{f_{ph} - f_0}{\tau} + Q. \qquad (13)$$

В правой части (13) источник $Q = Q(t, \mathbf{x})$ описывает мощность выделения тепловой энергии в единице объема, в общем случае зависящую от времени t и координат $\mathbf{x}$.

Для того чтобы перенести методы, представленные выше, на случай внешнего энерговыделения, введем псевдотемпературу источника. За время Δt в ячейке выделится энергия $E_Q \Delta V = Q \Delta V \Delta t$. Используя формулу (11), для ячейки ijk получим

$$E_{Q,ijk} = \frac{3\left(k_b T_{ijk}^{(Q)}\right)^4}{2\pi^2 c_s^3 \hbar^3} \int_0^{\Theta/T_{ijk}^{(Q)}} \frac{y^3 dy}{\exp[y-1]}. \qquad (14)$$

Уравнение (14) определяет псевдотемпературу источника, в отличие от определения температуры решетки согласно формуле (11). Фононы, связанные с источником, генерируются так же, как и тепловые фононы. Соответствующие вероятности рождения фонона с энергией $\hbar\tilde{\omega}_n = 0.5\left(\hbar\omega_n + \hbar\omega_{n+1}\right)$ имеют тот же вид, что и для тепловых фононов с заменой температуры решетки на псевдотемпературу источника

$$p_n = \int_{\hbar\omega_n / k_b T^{(Q)}}^{\hbar\omega_{n+1} / k_b T^{(Q)}} \frac{y^3 dy}{\exp[y-1]} \Bigg/ \int_0^{\Theta/T_{ijk}^{(Q)}} \frac{y^3 dy}{\exp[y-1]}.$$

Как правило, $T_Q \square T$, поэтому время релаксации «горячих» фононов на данном шаге по времени Δt рассчитывается через псевдотемпературу T_Q. Алгоритм моделирования движения и рассеяния сохраняется таким же, как и для тепловых фононов. После окончания текущего шага по времени Δt рассчитывается новый баланс энергии в ячейке с учетом прихода и ухода фононов, а также тепла, выделенного внешним источником. Соответственно, псевдотемпература в ячейке пересчитывается. Так учитывается вклад «горячих» фононов. На следующем шаге по времени «горячие» фононы становятся неотличимыми от тепловых.

Рассмотрим моделирование нагрева внешним источником одной стенки однородного образца из кремния в форме куба со стороной 200 нм. В первоначальный момент времени в кремнии задается температура 300 К. На образец

наложена разностная сетка 20x20x20.Энергия плотностью 0.002 кал/см^3 выделяется в пристеночном слое ячеек сетки за 0.1 нс.

На рисунке 8 показаны зависимости температуры от координаты *x* вдоль направления градиента энерговыделения. Зависимости соответствуют последовательным моментам времени и иллюстрируют процесс нагрева передней стенки и перераспределения тепла в ходе действия источника. Синий цвет соответствует 0.01 нс с момента начала расчета, зеленый – 0.02 нс, оранжевый – 0.05 нс, красный – 0.1 нс. Видно, что за время действия источника тепловая волна распространяется на расстояние порядка 100 нм.

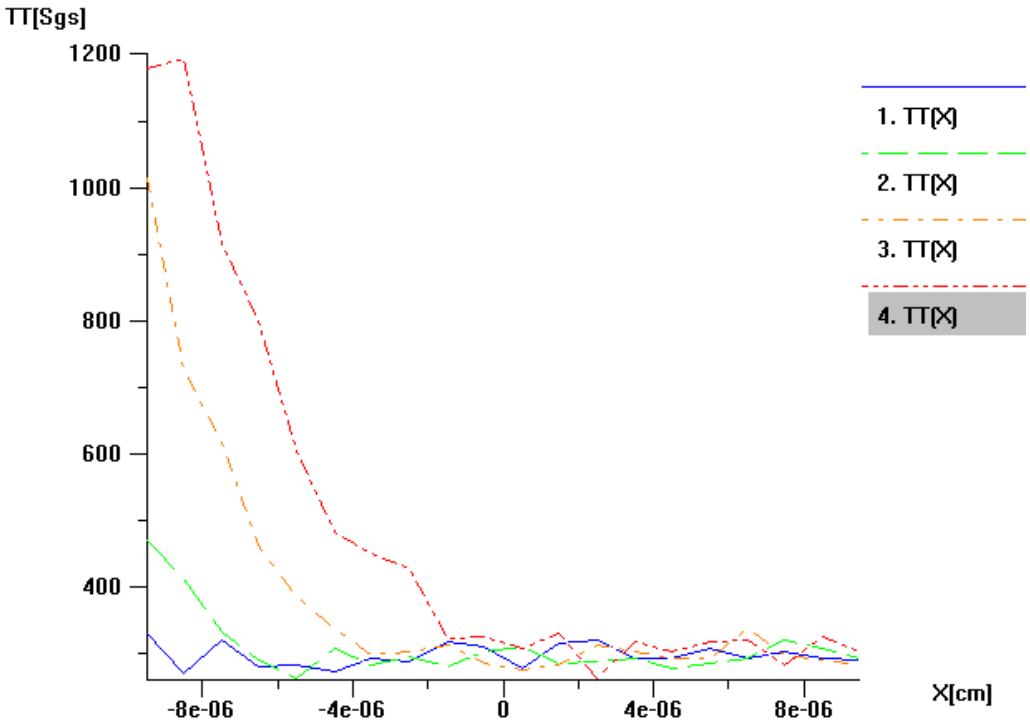

Рис. 8. Зависимость температуры от координаты *x* при импульсном нагреве стенки образца

Процесс релаксации энергии после действия источника показан на рисунке 9. Красный цвет соответствует 0.1 нс с момента начала расчета, оранжевый – 0.2 нс, зеленый – 0.4 нс, синий – 1 нс. Видно, что за время порядка 1 нс в образце устанавливается тепловое равновесие. Энергия перераспределяется, и температура устанавливается на уровне порядка 650 К.

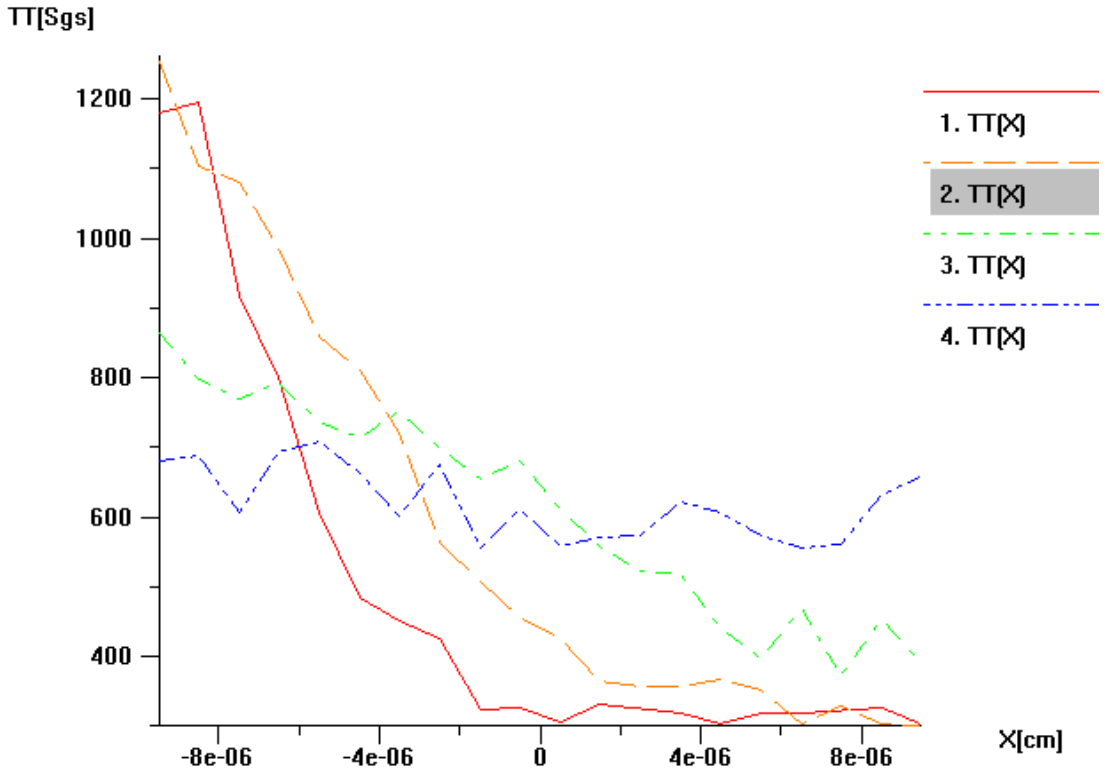

Рис. 9. Зависимости температуры от координаты *x* в ходе релаксации энергии в образце

Заключение

Перенос ионизирующего излучения в кристаллических полупроводниках и диэлектриках сопровождается выделением энергии. Поглощенная веществом энергия первоначально существует в виде энергии фотонов, быстрых электронов, возбужденных состояний молекул и т.д. Энергия, аккумулированная в фотонах и электронах, в конечном итоге трансформируется в энергию оптических мод решетки – оптические фононы. Температура оптических мод в кремнии в среднем составляет $T_Q \approx 720^o$ К, что значительно выше температуры решетки $T \approx 300^o$ К. Исследование процесса установления теплового равновесия в кристалле после воздействия излучений представляет интерес с точки зрения радиационной стойкости электронных приборов с наноструктурированными активными зонами [18].

Фактически в кристалле, находящемся под действием излучения, существуют две подсистемы фононов: оптические ветви («горячие» фононы) и акустические ветви (тепловые фононы). Соответственно, в разделе 3 проведены расчеты релаксации энергии за счет акустических мод для относительно малых отклонений от равновесия.

Важно отметить, что две подсистемы фононов, образующихся под действием внешнего источника энерговыделения, имеют разную псевдотемпературу. Для тепловых фононов она совпадает с температурой решетки кристалла, тогда как псевдотемпература «горячих» фононов задается через энерговыделение в ячейке. Такая постановка задачи позволяет рассматривать произвольные отклонения от равновесия.

Библиографический список

1. Debye P.J.W., Nernst W., Smoluchowski M., Sommerfeld A., Lorentz H.A. Fortrage uber die kinetische Teorie der Materie und der Elektrizitat. Ed. B.G. Teubner, Leipzig: Teubner, 1914.
2. Peierls R.E. Quantum Theory of Solids. Oxford: Clarendon Press, 1955.
3. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния. М.: Наука, 1973, 448 с.
4. Klemens P.G. Thermal conductivity and lattice vibration modes. Encyclopedia of Physics, V.14, Berlin: Springer-Verlag, 1956, P. 198.
5. Callaway J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures // Phys. Rev. 1959. V.113. №3. P. 1046-1051.
6. Reissland J.A. The Physics of Phonons. New York: John Wiley and Sons Ltd. 1973.
7. Minnich A.J., Chen G., Mansoor S., Yilbas B.S. Quasiballistic heat transfer studied using the frequency-depended Boltzmann transport equation // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 235207-8.
8. Minnich A.J. Advances in measurements and computation of thermal phonon transport properties // J. Phys.: Condens. Matter. 2015. V. 27. 053202-21.
9. Mazumder S., Majumdar A. Monte Carlo study of phonon transport in solid thin films including dispersion and polarization // J. of Heat Transfer. 2001. V. 123. P.749-759.
10. Berezin A.V., Volkov Y.A., Markov M.B., Tarakanov I.A. Simulation of the Electron-Phonon Interaction in Silicon // Mathematical Models and Computer Simulations. 2019. V.11. №4. P. 542-550.
11. Berezin A.V. at al. Particle method for electrons in scattering medium // Mathematical Models and Computer Simulations. 2015. V.55. №9. P. 1534-1546.
12. Дмитриев А.С. Тепловые процессы в наноструктурах. М.: Издательский дом МЭИ, 2012, 303 с.
13. Ward A., Broido D.A. Intrinsic phonon relaxation times from first-principles studies of the thermal conductivities of Si and Ge // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 085205-5.
14. Guyer R.A., Krumhansl J.A. Solution of the linearized phonon Boltzmann equation // Phys. Rev. 1966. V. 148. P. 766-778.
15. Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B. Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter. Basel: Birkhauser. 2005.

16. Hockney R.W., Eastwood J.W. Computer simulation using particles. McGraw-Hill Inc. 1981.
17. Sobol I.M. Computational Methods of Monte Carlo. Nauka, Moscow, 1973.
18. Pop E. Energy dissipation and transport in nanoscale devices // Nano Res. 2010, V.3, P.147-169.