

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КРЕМНИЯ С ДЕТАЛЬНЫМ УЧЕТОМ КИНЕТИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОНОНОВ

В.И. Хвесьюк

В. Цяо

А.А. Баринов

khvesyuk@bmstu.ru

venpei.tsyao@yandex.ru

barinov@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Впервые предложен метод расчета теплопроводности неметаллических твердых тел на основе детального учета взаимодействия переносчиков теплоты — квазичастиц — фононов. Взаимодействия фононов значительно сложнее, чем классических атомов и молекул. Необходимо учитывать такие особенности взаимодействия, как наличие двух типов фононов с различными свойствами; распад одного фонона на два или слияние двух фононов в один в результате взаимодействия; наличие двух типов взаимодействия фононов, одно из которых является упругим, другое — неупругим (причем тип взаимодействия строго определяется в результате решения уравнений сохранения энергии и квазиимпульса). Существующие методы определения теплопроводности, основанные в большинстве случаев на решении транспортного уравнения Больцмана, используют метод итераций, параметром которого является среднее время между последовательными взаимодействиями фононов. Результаты расчета содержат ограниченную информацию обо всех типах взаимодействия. В настоящей работе развит метод Монте-Карло прямого моделирования диффузии фононов со строгим учетом их взаимодействия за счет непосредственного использования законов сохранения энергии и квазиимпульса. Проведенные расчеты коэффициента теплопроводности для чистого кремния в диапазоне значений температуры 100...300 К показали хорошее согласие с экспериментом и расчетами других авторов, а также позволили в деталях рассмотреть кинетику фононов

Ключевые слова

Твердое тело, фононы, диффузия, теплопроводность

Поступила 06.12.2021

Принята 28.01.2022

© Автор(ы), 2022

Введение. Расчеты теплопроводности полупроводников и диэлектриков основаны на решении транспортного уравнения Больцмана (ВТЕ) с учетом различных процессов взаимодействия фононов. Впервые это предложил Пайерлс. В настоящей работе рассмотрены фонон-фононные процессы взаимодействия, которые играют определяющую роль. Обычная практика их учета сводится к определению зависимостей от температуры и частоты (энергии) времени жизни фононов для нормальных процессов τ_N и процессов переброса τ_U . Затем по правилу Маттиссена определяется полное время фонон-фононных взаимодействий: $\tau_{NU}^{-1} = \tau_N^{-1} + \tau_U^{-1}$. Величина τ_{NU} учитывает сложные трехфононные процессы взаимодействия при определении теплопроводности неметаллических твердых тел. В настоящее время разработана теория *ab initio* (из первых принципов), не требующая использования эмпирических данных и обеспечивающая достаточно надежные предсказательные сведения о теплопроводности различных материалов [1–4].

Процессы взаимодействия фононов друг с другом являются сложными и многофакторными [5]. Во-первых, необходим учет поляризации фононов: поперечные/продольные; акустические/оптические. Рассмотрены именно акустические фононы, так как скорость распространения оптических фононов мала, поэтому ими в расчетах теплопроводности пренебрегают. Во-вторых, процессы взаимодействия трех фононов могут приводить к слиянию двух фононов или к распаду одного фонона на два. В-третьих, необходим учет как упругих (нормальных), так и неупругих процессов взаимодействия фононов (процессов переброса), а также гармонических и ангармонических взаимодействий атомов твердотельных решеток.

Предпринята попытка рассчитать теплопроводность с независимым учетом N - и U -процессов, используя законы сохранения энергии и квазиимпульсов фононов, на примере кремния. Суть заключается в следующем. Вместо решения уравнения ВТЕ предложен расчет диффузии фононов в собственном газе, аналогичный расчету самодиффузии классических атомов или молекул [6] с использованием прямого моделирования Монте-Карло. Это позволяет определить коэффициент диффузии фононов в кремнии в зависимости от температуры. Произведение коэффициента диффузии и теплоемкости дает оценку теплопроводности кремния. Такой подход использован в [7], где, во-первых, учитывались только U -процессы взаимодействия фононов, во-вторых, реализован обычный подход, основанный на использовании правила Маттиссена. Очевидно, что использование правила Маттиссена исключает возможность точного описания про-

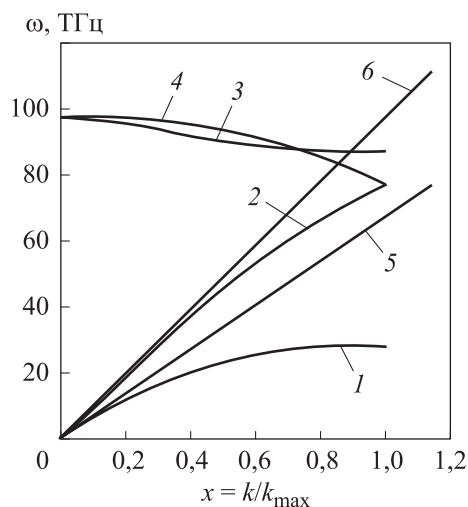
цессов взаимодействия фононов. Кроме того, существуют соображения о некорректности этого правила. Утверждается, что оно справедливо только, если время жизни фононов, входящее в это выражение, имеет одинаковую зависимость от частоты [8], что не выполняется. Не выполняются и некоторые другие условия [9].

Описание алгоритма расчета. Расчет методом Монте-Карло начнем [5] с задания температуры T материала и свойств среды. Во-первых, это дисперсионные соотношения $\omega(k)$, устанавливающие взаимосвязь частоты фонона и волнового числа, а также определяющие допустимый диапазон изменения частоты (энергии) фононов [10]. Важность этих соотношений связана с двумя обстоятельствами. Во-первых, видно ограничение на волновое число k — величина k_{\max} и, соответственно, ограничение на максимальную частоту фононов поляризации j (поперечной T и продольной L). Во-вторых, зависимости $\omega(k)$ позволяют определить групповые скорости фононов: $v_g = \partial\omega / \partial k$.

Одной из особенностей твердых тел является то, что атомы в них расположены в виде решеток определенной конфигурации. Так, в кремнии это гранецентрированная кубическая решетка. Свойства решетки (дисперсионные соотношения) в разных направлениях (например, вдоль грани куба или вдоль его диагонали) несколько отличаются. Обычно этими отличиями пренебрегают, полагая, что свойства во всех направлениях одинаковы (изотропное приближение). Здесь рассмотрим изотропное приближение, при этом свойства соответствуют направлению [100] кристаллической решетки, а зависимости $\omega(k)$ получены путем полиномиальной аппроксимации экспериментальных данных, проведенной в [11], и представлены на рис. 1.

Рис. 1. Дисперсионные кривые $\omega(k)$ для кремния:

1, 2 — акустические фононы поперечной (TA) и продольной (LA) поляризации;
3, 4 — оптические фононы поперечной (TO) и продольной поляризации;
5, 6 — дисперсионные соотношения в приближении Дебая (постоянной скорости) для продольной и поперечной поляризации



Зададим время между последовательными взаимодействиями фононов друг с другом для нормальных процессов $\tau_N(\omega, T)$ и процессов переброса $\tau_U(\omega, T)$. Здесь использовано время, полученное в рамках метода *ab initio* [12], что позволяет избежать применения эмпирических параметров [11]. Так, для кремния используем время релаксации, полученное Вордом и Бройдо [12]:

$$\tau_N(\omega, T) = A_{N,j}\omega^2 T f(T); \quad \tau_U(\omega, T) = A_{U,j}\omega^4 T f(T), \quad (1)$$

где $f(T) = 1 - \exp(-3T/\theta_D)$. Значения коэффициентов $A_{N,j}$, $A_{U,j}$ и температуры Дебая θ_D представлены в [12].

Далее изучим диффузию фононов в собственном газе [13]. Существенное отличие диффузии фононов от диффузии классических атомов или молекул заключается в том, что вызвавший взаимодействие в определенной точке фонон исчезает, дальше диффузию продолжает другой фонон. Поэтому время между последовательными взаимодействиями фононов часто называют временем жизни фононов. В соответствии с [14, 15] рассмотрены следующие процессы взаимодействия фононов:

$$LA \leftrightarrow TA + TA, \quad LA \leftrightarrow TA + LA. \quad (2)$$

Здесь LA, TA — продольная и поперечная акустические волны. Для анализа взаимодействия фононов используют уравнения сохранения энергии и квазиимпульса при взаимодействии фононов. Для нормальных процессов (слияние или распад фононов) имеем:

$$\omega_1 + \omega_2 = \omega_3; \quad \omega_1 = \omega_2 + \omega_3; \quad (3)$$

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3; \quad \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3; \quad (4)$$

для процессов с перебросом —

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{G}. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{G} — вектор обратной решетки; U-процесс возникает в тех случаях, когда абсолютная величина $|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2|$ оказывается больше, чем возможное максимальное значение волнового вектора k_{\max} . Добавление \mathbf{G} обеспечивает появление волнового вектора \mathbf{k}_3 внутри первой зоны Бриллюэна ($k_3 < k_{\max}$) и сохранение энергии фонона.

Далее реализуем метод Моте-Карло с использованием алгоритма, предложенного в [16], с добавлением непосредственного решения уравнений сохранения энергии и квазиимпульса (3)–(5). В начале расчета в точке (0, 0) задаем параметры первого фонона. Для этого спектр частот фононов разбиваем на N^j равных интервалов: $\Delta\omega = (\omega_{\max}^j - \omega_{\min}^j) / N^j$,

где ω_{\max}^j , ω_{\min}^j — максимальное и минимальное значения частоты фононов поляризации j . Затем определяем число фононов в каждом i -м интервале частот:

$$N_i^j = f(\omega_{0i}, T) D_j(\omega_{0i}) \Delta\omega, \quad (6)$$

где $f(\omega_{0i}, T)$ — распределение Бозе — Эйнштейна; ω_{0i} — частота фонона в центре i -го интервала частот; $D_j(\omega_{0i})$ — функция плотности состояний фононов [11].

Затем определяем поляризацию первого фонона. Для этого вводим вероятность появления фонона поляризации j :

$$P_L = \frac{N_b^L}{N_b^T + N_b^L}, \quad (7)$$

где N_b^j — полное число фононов поляризации j , получаемое из (6) за счет предельного перехода к интегрированию по спектру частот,

$$N_b^j = \int_{\omega_{\min}^j}^{\omega_{\max}^j} f(\omega, T) D_j(\omega) d\omega. \text{ Если случайное число } R \in [0, 1] \text{ меньше } P_L,$$

то поляризация первого фонона — продольная, $j = \text{LA}$. Если $R \in [P_L, 1]$, то поляризация — поперечная, $j = \text{TA}$.

Далее находим частоту первого фонона. Вводим кумулятивные нормализованные функции плотности:

$$F_i^j = \frac{\sum_{m=1}^{N_i^j} N_m^j}{\sum_{m=1}^{N_b^j} N_m^j}. \quad (8)$$

Случайное число $R \in [0, 1]$ позволяет определить частоту ω_i^j , если $F_{i-1}^j \leq R \leq F_i^j$, то частота фонона находится в i -м интервале и равна $\omega_i = \omega_{0,i} + (2R - 1)\Delta\omega / 2$.

По значению частоты из дисперсионного соотношения $\omega(k)$ определяем абсолютное значение волнового вектора \mathbf{k} . Для определения направления рассмотрим сферическую систему координат, в которой азимутальная (φ) и полярная (θ) координаты связаны соотношениями $\cos \theta = 2R_1 - 1$ и $\varphi = 2\pi R_2$, где R_1 , R_2 — случайные числа между нулем и единицей. Затем определим групповую скорость фонона $v_g = d\omega / dk$.

Далее рассмотрим дрейф фонона вдоль вектора \mathbf{k} в целях определения длины пробега. Вводим интервал времени Δt меньше среднего времени жизни фонона и записываем вероятность

$$P_f^j = 1 - \exp(-s\Delta t / \tau_{ph,j}). \quad (9)$$

Здесь $s = 1, 2, 3, \dots$ и т. д. Для первого значения $s\Delta t$, когда $R < P_f^j$, получаем время пролета $\tau = s\Delta t$ и длину свободного пробега $l = v_g \tau$. Время между последовательными взаимодействиями фононов $\tau_{ph,j}$ определяем на каждом шаге в зависимости от типа фонона и типа взаимодействия: время пролета продольного фонона при реализации нормального процесса взаимодействия $\tau_{N,L}$, то же при реализации U -процесса $\tau_{U,L}$ и аналогично для поперечных фононов: $\tau_{N,T}$, $\tau_{U,T}$.

Затем рассчитываем новые координаты фонона и рассматриваем взаимодействие трех фононов. Для этого сначала определим тип второго фонона, используя (7). Если этот фонон продольный, то из (2) следует, что возможны только N -процессы, т. е. при рассмотрении следующего пролета следует использовать $\tau_{N,L}$. Если этот фонон поперечный, то необходимо сначала изучить взаимодействие фононов [5, 13], после чего определить тип процесса (N или U) в зависимости от соотношения $|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2|$ и значений k_3 и k_{\max} . В качестве $\tau_{ph,j}$ взяты $\tau_{N,j}$ и $\tau_{U,j}$ (1) из [12].

Следовательно, анализ взаимодействия проводим следующим образом. Определяем тип, частоту, групповую скорость и волновое число второго фонона, как это выполняется для первого фонона. Затем из (3) находим частоту третьего фонона, а из (4) — направления волновых векторов второго и третьего фононов, а также абсолютное значение волнового вектора третьего фонона. Определяем тип взаимодействия фононов: N - или U -процесс. Затем с использованием (9) анализируем дрейф третьего фонона, определяем его новые координаты и описанными выше способами изучаем взаимодействие с двумя другими фононами. В зависимости от типа взаимодействия в (9) используем $\tau_{N,j}$ и $\tau_{U,j}$. Это обеспечивает отдельный учет N - или U -процессов вместо применения правила Маттиссена. В результате появляется возможность уточнения значений $\tau_{N,j}$ и $\tau_{U,j}$, а также определения долей этих процессов.

Результаты. Для примера рассмотрим кинетику фононов в чистом кремнии в диапазоне значений температуры 100...300 К. В результате статистической обработки последовательных актов взаимодействия фононов (2)–(9) проводим расчет коэффициентов переноса. Так, коэффициент диффузии $D(T)$ определяем из выражения [6]:

$$\langle L^2 \rangle = 2D(T)t.$$

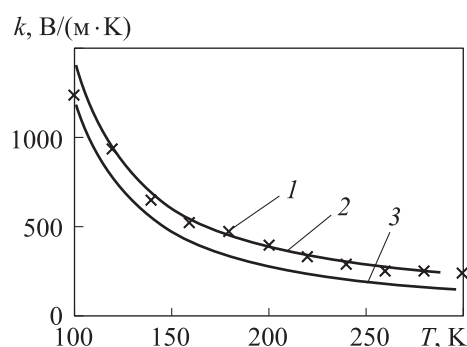
Здесь $\langle L^2 \rangle$ — среднее расстояние от начальной точки (0, 0) до точки, где фонон находится в момент времени t . Если известен коэффициент диффузии, то теплопроводность определяем так [7]:

$$k(T) = C(T)D(T),$$

где $C(T)$ — теплоемкость кремния. Это очень удобный способ определения теплопроводности, но он вносит некоторую неопределенность в конечный результат, так как точная формула для теплопроводности представляет собой интеграл по спектру частот фононов [11]. Результаты расчета коэффициента теплопроводности для чистого кремния приведены на рис. 2. Наблюдается хорошее согласие как с расчетами методом *ab initio* [17], так и с экспериментальными данными [18].

Рис. 2. Результаты расчета коэффициента теплопроводности кремния:

1 — расчеты, полученные в настоящей работе; 2 — результаты моделирования *ab initio* [17]; 3 — аппроксимация экспериментальных данных [18]



Далее определяем доли N - или U -процессов, для чего проводим подсчет общего числа каждого процесса и определяем их доли. Так, расчеты показали, что в диапазоне значений температуры 100...300 К эти доли приблизительно постоянны и составляют $P_N \sim 0,6$ и $P_U \sim 0,4$. Это означает, что соотношение между N - и U -процессами составляет 3 : 2. Аналогично были получены доли различных типов взаимодействий (2), представленные в таблице.

Доли слияния и распада от общего числа фонон-фононных взаимодействий ($T = 300$ К)

Процесс	Формула	Доля, %
Слияние	$TA + TA \rightarrow LA$	27,6
	$TA + LA \rightarrow LA$	22,5
Распад	$LA \rightarrow TA + TA$	26,0
	$LA \rightarrow TA + LA$	23,9

Заключение. Предложен метод определения теплопроводности неметаллических твердых тел, основанный на прямом моделировании

Монте-Карло без использования правила Маттиссена для определения коэффициентов переноса. Представленный метод позволил строго учесть законы сохранения энергии и квазиимпульса при рассмотрении взаимодействия фононов друг с другом, а также напрямую определить доли различных процессов фонон-фононных взаимодействий, что является его отличительной особенностью.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Omini M., Sparavigna A. Beyond the isotropic-model approximation in the theory of thermal conductivity. *Phys. Rev. B*, 1996, vol. 53, iss. 14, pp. 9064–9073. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.9064>
- [2] Baroni S., de Gironcoli S., Dal Corso A., et al. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Rev. Mod. Phys.*, 2001, vol. 73, iss. 2, pp. 515–562. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.515>
- [3] Mingo N., Yang L. Phonon transport in nanowires coated with an amorphous material: An atomistic Green's function approach. *Phys. Rev. B*, 2003, vol. 68, iss. 24, art. 245406. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.245406>
- [4] Savić I., Mingo N., Stewart D.A. Phonon transport in isotope-disordered carbon and boron-nitride nanotubes: is localization observable? *Phys. Rev. Lett.*, 2008, vol. 101, iss. 16, art. 165502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.165502>
- [5] Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. The effect of phonon diffusion on heat transfer. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, vol. 385, art. 012046. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1385/1/012046>
- [6] Бекман И.Н. Математика диффузии. М., ОнтоПринт, 2016.
- [7] Kukita K., Kamakura K. Monte Carlo simulation of phonon transport in silicon including a realistic dispersion relation. *J. Appl. Phys.*, 2013, vol. 114, no. 15, art. 154312. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4826367>
- [8] Feng T., Qiu B., Ruan X. Coupling between phonon-phonon and phonon-impurity scattering: a critical revisit of the spectral Matthiessen's rule. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 92, iss. 23, art. 235206. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.235206>
- [9] Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid state physics. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [10] Vermeersch B., Mohammed A.M.S., Pernot G., et al. Superdiffusive heat conduction in semiconductor alloys. II. Truncated Lévy formalism for experimental analysis. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 91, iss. 8, art. 085203. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.085203>
- [11] Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I., et al. Updated model for thermal conductivity calculation of thin films of silicon and germanium. *Phys. Atom. Nuclei*, 2020, vol. 83, no. 10, pp. 1539–1542. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063778820100038>

- [12] 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, vol. 81, iss. 8, art. 085205. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.085205>
- [13] Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. Modeling of phonon diffusion using a Monte-Carlo method based on physics of phonon. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, vol. 1368, no. 4, art. 042051. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1368/4/042051>
- [14] Herpin A. Contribution à l'étude de la théorie cinétique des solides. *Ann. Phys.*, 1952, vol. 12, no. 7, pp. 91–139. DOI: <https://doi.org/10.1051/anphys/195212070091>
- [15] Klemens P.G. Lattice thermal conductivity. *Solid State Phys.*, 1958, vol. 7, no. 1, pp.1–98. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60551-2](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60551-2)
- [16] Mazumder S., Majumdar A. Monte Carlo study of phonon transport in solid thin films including dispersion and polarization. *J. Heat Transfer*, 2001, vol. 123, no. 4, pp. 749–759. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.1377018>
- [17] Mingo N., Stewart D.A., Broido D.A., et al. *Ab initio* thermal transport. In: Shindé S.L., Srivastava G.P. (eds). *Length-Scale Dependent Phonon Interactions. Topics in Applied Physics*, vol. 128. New York, Springer, 2014, pp 137–173. DOI: https://doi.org/10.1007/978-1-4614-8651-0_5
- [18] Inyushkin A.V., Taldenkov A.N., Giblin A.M., et al. On the isotope effect in thermal conductivity of silicon. *Phys. Stat. Solid C, Spec. Iss.: The 11th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter (Phonons2004)*, 2004, vol. 1, iss. 11, pp. 2995–2998. DOI: <https://doi.org/10.1002/pssc.200405341>

Хвесюк Владимир Иванович — д-р техн. наук, профессор кафедры «Теплофизика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Цяо Вэньпей — аспирант кафедры «Теплофизика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Баринов Александр Алексеевич — старший преподаватель кафедры «Теплофизика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Пробьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Хвесюк В.И., Цяо В., Баринов А.А. Определение теплопроводности кремния с детальным учетом кинетики взаимодействия фононов. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2022, № 3 (102), с. 57–68. DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-3-57-68>

KINETICS OF PHONON INTERACTION TAKEN INTO ACCOUNT IN DETERMINING THERMAL CONDUCTIVITY OF SILICON

V.I. Khvesyuk

W. Qiao

A.A. Barinov

khvesyuk@bmstu.ru

venpei.tsyao@yandex.ru

barinov@bmstu.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

The thorough study of the heat carriers — quasiparticles — phonons interaction resulted in a pioneering method for calculating the thermal conductivity of nonmetallic solids. As the interactions of phonons are much more complicated than those of usual atoms and molecules, it is necessary to take into account the presence of two types of phonons with different properties; the decay of one phonon into two or the fusion of two phonons into one as a result of interaction; the presence of two types of interaction of phonons, one of which is elastic, the other is inelastic (moreover, the type of interaction results from solving the energy and quasi-momentum conservation equations). The existing methods for determining thermal conductivity, which typically involve solving the Boltzmann transport equation, use the iteration method, whose parameter is the average time between successive phonon interactions, and the calculation results provide little information on all types of interactions. In this research, we developed a method of direct Monte Carlo simulation of phonon diffusion with strict account for their interaction owing to the energy and quasi-momentum conservation laws. Calculations of the thermal conductivity coefficient for pure silicon in the temperature range of 100–300 K showed good agreement with the experiment and calculations of other authors, and also made it possible to consider the phonon kinetics in detail

Keywords

Solid, phonons, diffusion, thermal conductivity

Received 06.12.2021

Accepted 28.01.2022

© Author(s), 2022

REFERENCES

- [1] Omini M., Sparavigna A. Beyond the isotropic-model approximation in the theory of thermal conductivity. *Phys. Rev. B*, 1996, vol. 53, iss. 14, pp. 9064–9073.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.9064>

- [2] Baroni S., de Gironcoli S., Dal Corso A., et al. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Rev. Mod. Phys.*, 2001, vol. 73, iss. 2, pp. 515–562. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.515>
- [3] Mingo N., Yang L. Phonon transport in nanowires coated with an amorphous material: An atomistic Green's function approach. *Phys. Rev. B*, 2003, vol. 68, iss. 24, art. 245406. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.245406>
- [4] Savić I., Stewart D.A., Mingo N. Phonon transport in isotope-disordered carbon and boron-nitride nanotubes: is localization observable? *Phys. Rev. Lett.*, 2008, vol. 101, iss. 16, art. 165502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.165502>
- [5] Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. The effect of phonon diffusion on heat transfer. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, vol. 385, art. 012046. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1385/1/012046>
- [6] Bekman I.N. *Математика диффузии [Diffusion mathematics]*. Moscow, OntoPrint Publ., 2016.
- [7] Kukita K., Kamakura K. Monte Carlo simulation of phonon transport in silicon including a realistic dispersion relation. *J. Appl. Phys.*, 2013, vol. 114, no. 15, art. 154312. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4826367>
- [8] Feng T., Qiu B., Ruan X. Coupling between phonon-phonon and phonon-impurity scattering: a critical revisit of the spectral Matthiessen's rule. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 92, iss. 23, art. 235206. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.235206>
- [9] Ashcroft N.W., Mermin N.D. *Solid state physics*. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [10] Vermeersch B., Mohammed A.M.S., Pernot G., et al. Superdiffusive heat conduction in semiconductor alloys. II. Truncated Lévy formalism for experimental analysis. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 91, iss. 8, art. 085203. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.085203>
- [11] Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I., et al. Updated model for thermal conductivity calculation of thin films of silicon and germanium. *Phys. Atom. Nuclei*, 2020, vol. 83, no. 10, pp. 1539–1542. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063778820100038>
- [12] 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, vol. 81, iss. 8, art. 085205. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.085205>
- [13] Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. Modeling of phonon diffusion using a Monte-Carlo method based on physics of phonon. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, vol. 1368, no. 4, art. 042051. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1368/4/042051>
- [14] Herpin A. Contribution à l'étude de la théorie cinétique des solides. *Ann. Phys.*, 1952, vol. 12, no. 7, pp. 91–139. DOI: <https://doi.org/10.1051/anphys/195212070091>
- [15] Klemens P.G. Lattice thermal conductivity. *Solid State Phys.*, 1958, vol. 7, no. 1, pp. 1–98. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60551-2](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60551-2)
- [16] Mazumder S., Majumdar A. Monte Carlo study of phonon transport in solid thin films including dispersion and polarization. *J. Heat Transfer*, 2001, vol. 123, no. 4, pp. 749–759. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.1377018>

[17] Mingo N., Stewart D.A., Broido D.A., et al. *Ab initio* thermal transport. In: Shindé S.L., Srivastava G.P. (eds). *Length-Scale Dependent Phonon Interactions. Topics in Applied Physics*, vol. 128. New York, Springer, 2014, pp 137–173.

DOI: https://doi.org/10.1007/978-1-4614-8651-0_5

[18] Inyushkin A.V., Taldenkov A.N., Giblin A.M., et al. On the isotope effect in thermal conductivity of silicon. *Phys. Stat. Solid C, Spec. Iss.: The 11th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter (Phonons2004)*, 2004, vol. 1, iss. 11, pp. 2995–2998. DOI: <https://doi.org/10.1002/pssc.200405341>

Khvesyuk V.I. — Dr. Sc. (Eng.), Professor, Department of Thermophysics, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Qiao W. — Post-Graduate Student, Department of Thermophysics, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Barinov A.A. — Assist. Professor, Department of Thermophysics, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. Kinetics of phonon interaction taken into account in determining thermal conductivity of silicon. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2022, no. 3 (102), pp. 57–68 (in Russ.). DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-3-57-68>