

На правах рукописи



Чернодубов Даниил Андреевич

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НИТРИДА ГАЛЛИЯ И СТРУКТУР НА ЕГО ОСНОВЕ

Специальность 01.04.07 — Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва
2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт».

Научный руководитель: **Инюшкин Александр Васильевич,** кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ресурсного центра электрофизических методов Курчатовского комплекса НБИКС-природоподобных технологий, Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва.

Официальные оппоненты: **Попов Павел Аркадьевич,** доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры экспериментальной и теоретической физики физико-математического факультета Брянского государственного университета им. И.Г. Петровского, г. Брянск;

Седов Вадим Станиславович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории алмазных материалов Федерального исследовательского центра «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук», г. Москва.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург.

Защита состоится 20 мая 2021 г., начало в 16.30, на заседании диссертационного совета Д 520.009.01 на базе НИЦ «Курчатовский институт» по адресу: 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский институт» и на сайте www.nrcki.ru.

Автореферат разослан «___» _____ 2021 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 520.009.01, к.ф.-м.н.



В.А. Демин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Полупроводниковые нитриды металлов III группы, такие как GaN, AlN, InN, в последнее время являются одними из основных интенсивно исследуемых материалов для силовой, опто- и сверхвысокочастотной электроники, а также предлагаются к применению в качестве рабочих сред квантовых вычислителей. Из-за продолжающегося увеличения плотности размещения элементов на кристалле увеличивается плотность выделяемой тепловой мощности, что приводит к сильному локальному перегреву в областях малого размера. Перегрев негативно сказывается на рабочих характеристиках устройств, уменьшая максимальную мощность, максимальную рабочую частоту и срок службы. Поэтому изучение процессов, ограничивающих теплопроводность нитридных материалов и их структур, крайне важно для улучшения производительности устройств на их основе. Проведение точных измерений теплопроводности кристаллов и анализ полученных результатов с использованием различных теоретических подходов, в том числе первопринципных расчетов, позволит решить актуальные проблемы фундаментального характера, связанные с недостаточно исследованной структурой дефектов кристаллической решетки, в том числе легирующих примесей, в нитридных полупроводниках. Это позволит также целенаправленно подбирать легирующие примеси для достижения наилучших характеристик приборов.

Целью данной работы является установление особенностей механизма теплопроводности монокристаллов GaN и AlN как в виде объемных кристаллов, так и тонкопленочных структур, в том числе гетероструктур на их основе. Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Создать установку для проведения измерений теплопроводности пластин и тонких пленок методом «3-омега» в автоматическом режиме;
2. Исследовать влияние фононной фокусировки на теплопроводность гексагональных кристаллов GaN и AlN со структурой типа вюрцита, а также близких им полупроводников InN и SiC, в режиме граничного рассеяния фононов;

3. Определить экспериментально теплопроводность тонких пленок GaN и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в составе гетероструктур на подложке из монокристаллического сапфира и смоделировать теплоперенос в такой структуре;

4. Точно измерить величину теплопроводности наиболее чистых и совершенных объемных кристаллов GaN и AlN в широком диапазоне температур от 5 до 410 К, выявить основные процессы фононного рассеяния в этих полупроводниках, сравнив экспериментальные данные с результатами теоретических расчетов.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Теплопроводность гексагональных кристаллов GaN, AlN, InN, SiC в режиме граничного рассеяния анизотропна: уменьшена вдоль главных кристаллографических осей, но увеличена в направлении примерно 45° к оси c из-за эффекта фононной фокусировки. Впервые определены значения анизотропии для вкладов в теплопроводность поперечных и продольных фононов и суммарной величины теплопроводности.

2. Рассеяние фононов на носителях заряда, связанных с примесными атомами углерода, кислорода и кремния в концентрации порядка 10^{18} для GaN и 10^{19} см^{-3} для AlN, оказывает существенное влияние на температурную зависимость теплопроводности в нитридах галлия и алюминия при температурах ниже 100-150 К.

3. Измеренные в настоящей работе данные являются наиболее точными (с погрешностью абсолютных значений менее 3%) из опубликованных и близки к теплопроводности совершенных кристаллов GaN и AlN при температурах выше 100–150 К, где теплопроводность определяется фонон-фононными процессами рассеяния.

4. Набор буферных слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с разной атомной долей алюминия ($0 \leq x \leq 1$) с точки зрения теплопереноса эквивалентен одному слою той же толщины со средневзвешенным значением содержания алюминия, что подтверждается результатами измерений температурной зависимости теплопроводности при помощи метода «3-омега».

Научная новизна.

1. Впервые разработана методика измерения теплопроводности объемных образцов и тонких пленок в автоматическом режиме при изменении тем-

пературы, основанная на «3-омега» методе. Проведены измерения теплопроводности монокристаллического Al_2O_3 при температурах от 295 К до 330 К.

2. Уточнены особенности теплопереноса в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ на сапфире. Показано, что в контексте тепловых свойств набор буферных слоев нитрида алюминия-галлия с разной атомной долей алюминия эквивалентен одному слою той же толщины со средневзвешенным значением содержания алюминия.

3. Впервые рассчитана величина эффекта фононной фокусировки в гексагональных поли типах кристаллов нитрида галлия, нитрида алюминия, нитрида индия и карбида кремния, и влияние этого эффекта на их теплопроводность в режиме граничного рассеяния. Показано, что из-за фононной фокусировки величина теплопроводности анизотопна, при этом она уменьшается в направлении оси c и перпендикулярно ей и растет в направлении примерно 45° к оси c . Поперечные фононные моды T1 и T2 вносят наибольший вклад в теплопроводность, причем поведение моды T2 в основном определяет анизотропию теплопроводности кристаллов. Найдено, что в направлении примерно 60° к оси c значение теплопроводности не отличается от изотропного значения во всех исследованных гексагональных кристаллах. Показано, что в AlN анизотропия теплопроводности меньше, поскольку в поверхности групповой скорости отсутствует общая для других изученных кристаллов особенность — ребро возврата.

4. Полученные в результате точных измерений большие величины теплопроводности монокристаллов нитрида алюминия в широком температурном диапазоне позволили впервые обнаружить особенности температурной зависимости теплопроводности, обусловленные рассеянием фононов на связанных с легирующими примесями носителях заряда. Показано, что в исследуемых кристаллах AlN температурная зависимость теплопроводности практически полностью определяется трехфононными процессами рассеяния при температурах от 150 до 410 К.

5. Получены наиболее точные данные для теплопроводности монокристалла нитрида галлия в широком температурном интервале. Найдено, что в относительно чистом кристалле GaN (содержание примесей менее $3 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$) величина теплопроводности при температурах ниже 5.5 К более, чем на 90% определяется диффузным рассеянием фононов на границах

образца. В этом режиме величины теплопроводности GaN в направлениях вдоль и перпендикулярно базальной плоскости одинаковы с погрешностью менее 1%.

6. В случае кристалла GaN с концентрацией примесей менее 10^{18} см⁻³ ангармонические трехфононные процессы рассеяния играют главную роль в диапазоне температур от 100 до 200 К. Выше 200 К с ростом температуры возрастает роль рассеяния фононов в фонон-фононных процессах более высокого порядка.

Практическая значимость. Создана автоматизированная установка для измерения теплопроводности методом «3-омега» метода большого спектра материалов в широком диапазоне температур. Создано программное обеспечение для расчета фононной теплопроводности гексагональных кристаллов в режиме граничного рассеяния с учетом эффекта фононной фокусировки. Уточнены процессы фононного рассеяния в кристаллах нитрида галлия и нитрида алюминия, что способствует решению проблемы расчета тепловых режимов создаваемых на их основе устройств. Предложены оптимальные размеры гетероструктуры Al_xGa_{1-x}N/GaN на сапфире с целью обеспечения минимальной величины теплового сопротивления такой структуры.

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов измерений с использованием методов продольного теплового потока и 3-омега обоснована хорошим совпадением с данными других экспериментов и результатами теоретических расчетов теплопроводности нитридов галлия и алюминия как в виде объемных кристаллов, так и в составе гетероструктур. Кроме того, результаты измерений теплопроводности других хорошо изученных материалов (монокристаллов кремния, сапфира) с помощью использованных экспериментальных методик с хорошей точностью ($\sim 1\%$) совпадают рекомендованными в справочной литературе величинами. Сформулированные в диссертационной работе научные положения и выводы непротиворечивы и согласуются с фундаментальными физическими принципами.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих международных и всероссийских конференциях: IV ежегодном Всероссийском молодёжном научном форуме «Open Science» (г. Гатчина, 2017), 60-ой, 61-ой, 62-ой Всероссийских научных конференциях МФТИ (г. Москва, 2017, 2018, 2019), 10-й Юбилейной Международной научно-прак-

тической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «Мокеровские чтения» (г. Москва, 2019), XIV Российской конференции по физике полупроводников (г. Новосибирск, 2019), Пятом междисциплинарном научном форуме с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии» (г. Москва, 2019).

Личный вклад. Основная экспериментальная работа выполнена диссертантом самостоятельно. Автором создана компьютерная программа для расчета величины теплопроводности полупроводниковых кристаллов с гексагональной структурой в режиме граничного рассеяния с учетом эффекта фононной фокусировки. Он принял участие в исследовании теплопроводности объемных монокристаллов нитрида галлия и нитрида алюминия и их характеристики. Автор принял непосредственное активное участие в наладке, запуске и апробации системы для измерения теплопроводности тонкопленочных структур «3-омега» методом. Им были самостоятельно проведены измерения теплопроводности слоев гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ на сапфире, выполнен анализ полученных данных в рамках модели виртуального кристалла, и смоделирован теплоперенос в такой структуре. Диссертант активно участвовал в планировании исследований, подготовке научных докладов и написании статей, а также доложил результаты исследований по теме диссертации на ряде конференций.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 12 печатных изданиях, 5 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 7 — в тезисах докладов на конференциях. По результатам работы получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объем диссертации **119** страниц текста с **25** рисунками и 10 таблицами. Список литературы содержит **141** наименование.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

В **первой главе** рассмотрена модель фононной теплопроводности Каллуэя. Приведены существующие литературные данные по теплопроводности GaN, AlN и гетероструктур AlGaN на их основе, включая исследования влияния на величину их теплопроводности различных процессов фононного рассеяния. Описаны основные дефекты, существующие в этих кристаллах, и их влияние на тепловые и оптические свойства этих материалов.

Вторая глава посвящена описанию экспериментальных методов измерения теплопроводности, используемых в работе. Описано усовершенствование метода «3-омега» для проведения измерений теплопроводности гетероструктур GaN/AlGaN с толщинами слоев порядка микрометров в автоматическом режиме.

В **третьей главе** рассмотрено исследование особенностей теплопереноса в гетероструктурах на основе нитрида галлия.

В разделе 3.1 описана общая проблематика теплопереноса в таких структурах. При относительно высокой теплопроводности как AlN, так и GaN, теплопроводность их сплава $Al_xGa_{1-x}N$ может быть значительно, более чем на порядок величины, меньше. Значительные ограничения для теплопереноса создают и граничные тепловые сопротивления между слоями структуры. При этом граничное тепловое сопротивление между слоями $Al_xGa_{1-x}N$ с градиентным изменением массовой доли x много меньше сопротивления, вызываемого рассеянием на дефектах в сплаве, что позволяет рассматривать использование подобной структуры буферных слоев в качестве перспективной для оптимизации теплового поведения.

В разделе 3.2 приведено описание исследуемых образцов и измерения теплопроводности составляющих их слоев. Исследованы структуры двух типов, полученные нанесением на монокристаллическую сапфировую подложку толщиной 0.42 мм методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Структура 1 представляла собой набор буферных слоев $Al_xGa_{1-x}N$ общей толщиной $t = 580$ нм. Структура 2 дополнительно включала в себя слой GaN толщиной 1.5 мкм. Направление кристаллографической оси с сапфировой подложки совпадало с нормалью к ее плоскости и было перпендикулярно слоям гетероструктуры в обеих структурах.

Для измерения теплопроводности образцов на их поверхность с использованием фотолинтографии были нанесены пары золотых нагревателей

в форме полосок с одинаковой толщиной $t = 100$ нм, шириной $2b_1 = 10$ и $2b_2 = 20$ мкм и длиной l около 2 мм между потенциальными выводами. Измерения проводились при комнатной температуре в вакуумированной ячейке. Поскольку разность тепловых сопротивлений двух нагревателей $R_1 - R_2$ постоянна в широком интервале частот, измерив ее, можно определить теплопроводность тонкой пленки. Измеренная величина эффективной теплопроводности κ_{eff} буферного слоя толщиной $t = 580$ нм структуры 1 составила 1.15 ± 0.05 Вт/(м К) при комнатной температуре. Таким образом, общее тепловое сопротивление слоя составляет $TBR = t/\kappa = 504 \pm 22$ (м² К)/ГВт.

Теплопроводность слоя GaN была определена из разности тепловых сопротивлений $R = \Delta T/P$ нагревателей шириной 20 мкм, нанесенных на структуры со слоем нитрида галлия (структура 2) и без него (структура 1). Определено, что теплопроводность слоя GaN составляет 109 ± 6 Вт/(м К). Полученная величина более чем в 2 раза меньше теплопроводности объемного кристалла за счет влияния размеров образца на величину теплопроводности. Расчетная зависимость теплопроводности кристаллических пленок GaN от толщины пленки [1] хорошо согласуется с экспериментальным результатом, полученным для тонкой пленки GaN. Обратим внимание на то, что, поскольку граничное тепловое сопротивление между слоями GaN и Al_{0.05}Ga_{0.95}N мало, оно практически не влияет на определенное экспериментально значение.

В разделе 3.3 проведен анализ полученного результата с использованием модели виртуального кристалла Абелеса [2; 3]. В ней разупорядоченный сплав Al_xGa_{1-x}N представляется как упорядоченный кристалл со средневзвешенными атомными массами и объемами GaN и AlN, взятыми с весом, равным атомной доле соответствующего металла. Величина теплопроводности рассчитывается в приближении Дебая как

$$\kappa = \frac{k_B}{2\pi^2 v_D} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \tau dx, \quad (1)$$

где v_D — дебаевская скорость акустических фононов, Θ — температура Дебая, $x = \hbar\omega/k_B T$, ω — частота фононов, а скорость рассеяния фононов τ^{-1} определяется как сумма скоростей рассеяния фононов на поверхности образца τ_b^{-1} , на точечных дефектах τ_{pd}^{-1} и в ангармонических трехфононных процессах с перебросом τ_U^{-1} . Скорость рассеяния на поверхности образца определяется

как $\tau_b^{-1} = v_D/t$, где t — толщина кристалла. Скорость рассеяния в процессах переброса равна [4] $\tau_U^{-1} = \hbar\gamma^2 T\omega^2 \exp(-\Theta/3T)/Mv_D^2\Theta$, где γ — постоянная Грюнайзена, а M — средняя атомная масса виртуального кристалла.

Скорость рассеяния на точечных дефектах определяется как $\tau_{\text{pd}}^{-1} = \delta^3\Gamma\omega^4/4\pi v_D^3$, где δ — средний атомный объем сплава, а $\Gamma = \Gamma_{\text{imp}} + \Gamma_{\text{alloy}}$ — коэффициент рассеяния, слагаемые которого характеризуют рассеяние на примесях и составляющих сплава соответственно. Первое слагаемое Γ_{imp} для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ принимаем равным средневзвешенному для этих материалов из работ [5; 6]. Γ_{alloy} включает в себя слагаемые, обусловленные существованием в сплаве дефектов массы, локального объема и упругих постоянных. Как показано в работе [3], для изотропного кристалла можно объединить два последних слагаемых: $\Gamma_{\text{alloy}} = \sum x_j [((M_j - M)/M)^2 + \epsilon((\delta_j - \delta)/\delta)^2]$, где x_j , M_j и δ_j — атомная доля, атомная масса и атомный объем одной из компонент сплава, а коэффициент, связывающий дефекты объема и упругих постоянных $\epsilon = 2((4 + 6.4\gamma)(1 + \nu)/(3(1 - \nu)))^2$, где $\nu = C_{12}/(C_{11} + C_{12})$ — коэффициент Пуассона. Дебаевская скорость v_D и температура Дебая Θ , а также величина коэффициента $\epsilon = 54$ были строго вычислены из скоростей акустических фононов продольной и поперечной поляризации. Скорости фононов были определены из экспериментальных значений упругих модулей с помощью решения уравнения Кристоффеля.

Эффективная величина концентрации алюминия для структуры 1 ($x = 0.75$) определена как средневзвешенное значение концентраций составляющих ее слоев. Полученные экспериментальные данные представлены на рис. 1, где приведена также вычисленная зависимость теплопроводности сплава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в зависимости от концентрации алюминия. Видно, что имеется удовлетворительное согласие между экспериментальными и теоретическими данными, что подтверждает возможность рассмотрения набора слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ как эффективного слоя со средневзвешенным значением x .

Раздел 3.4 описывает результат численного моделирования теплопереноса в структуре $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ на сапфире с учетом полученных экспериментально значений. В качестве источника тепла использована область на верхней поверхности слоя GaN. Тепловое сопротивление R определено как отношение разности температур на верхней и нижней поверхностях структуры к прикладываемой тепловой мощности. Зависимость теплового сопротивле-

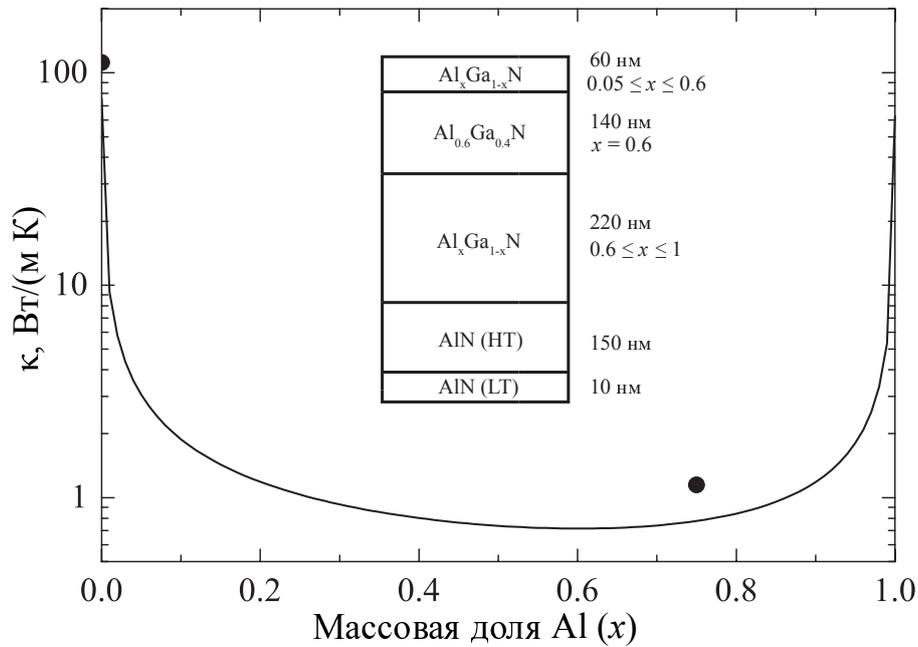


Рис. 1 — Зависимость теплопроводности слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ толщиной 580 нм от массовой доли алюминия при комнатной температуре в рамках модели виртуального кристалла. Точкой отмечены измеренные значения теплопроводности. Вставка: схематичное изображение исследуемых буферных слоев.

ния структуры от толщины слоя GaN представлена на рис. 2. Видно, что при малых толщинах слоя GaN слабое уширение теплового потока от области нагрева приводит к увеличению теплового сопротивления структуры. После достижения минимума теплового сопротивления на длине 3.6 мкм тепловое сопротивление структуры начинает расти из-за возрастающего теплового сопротивления непосредственно слоя GaN. Можно заключить, что оптимальная толщина слоя нитрида галлия с точки зрения тепловой эффективности с учетом технологических особенностей роста составляет более 2 мкм.

Проведены измерения абсолютной величины теплопроводности слоев, составляющих гетероструктуру $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Измеренные значения составили 1.15 ± 0.05 Вт/(м К) для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и 109 ± 6 Вт/(м К) для GaN. Полученный результат хорошо согласуется с литературными экспериментальными данными и результатами теоретических расчетов. Сравнение эксперимента с теоретическим значением теплопроводности сплава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ позволяет заключить, что с точки зрения тепловых свойств справедливо приближение набора слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с разным содержанием алюминия эффективным слоем той же толщины со средневзвешенной массовой долей x . В результате моделирования теплопереноса в структуре определено, что при толщине слоя GaN в 3.6 мкм общее тепловое сопротивление структуры минимально.

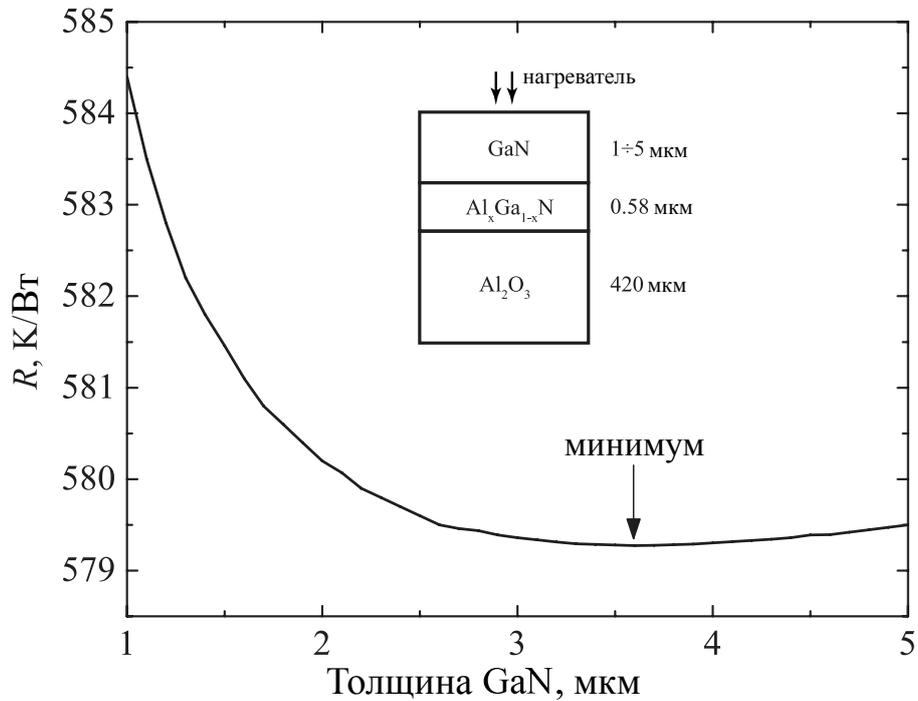


Рис. 2 — Зависимость теплового сопротивления структуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Точкой отмечен минимум сопротивления при толщине 3.6 мкм. Вставка: схематичное изображение смоделированной структуры.

В **четвертой главе** рассмотрено влияние фононной фокусировки на теплопроводность гексагональных политипов полупроводниковых кристаллов, а именно GaN, AlN, InN, SiC. Приведена методика вычисления низкотемпературной теплопроводности гексагональных кристаллов с учетом фононной фокусировки.

В разделе 4.1 описана суть эффекта фононной фокусировки и дан краткий экскурс в историю ее исследования. В разделе 4.2 описано нахождение скоростей звука в кристалле как решений уравнения Кристоффеля. Известно, что в кристалле напряжение σ_{ij} связано с деформацией ϵ_{kl} через упругие постоянные [7]. В свою очередь, зная упругие постоянные и плотность материала, можно определить фазовую скорость монохроматической плоской звуковой волны в кристалле как собственные значения матрицы Кристоффеля. Зная угловую зависимость фазовых скоростей, в рамках модели Дебая вычислена скорость Казимира v_C , скорость Дебая v_D , удельную теплоемкость на единицу объема C_v и температуру Дебая.

Раздел 4.3 посвящен особенностям, которые могут возникнуть в поверхности групповой скорости фононной моды. Зная, что $\vec{v} = \nabla \vec{s}$, можно получить аналитические выражения для групповых скоростей, соответствующих волновым векторам. Зная их, можно определить направления, при ко-

торых групповая скорость и волновой вектор сонаправлены. Наличие таких направлений подсказывает, что в их окрестности мы можем ожидать аномального поведения интенсивности фононов. Если производная угла групповой скорости моды по углу волнового вектора меньше единицы, то происходит ее фокусировка, в обратном случае — дефокусировка. В поверхности групповой скорости GaN в направлении около 45 градусов к оси c возникает особенность (ребро возврата). В его окрестности оказываются сонаправлены три вектора групповой скорости, порожденные различными волновыми векторами. В случае AlN ребро возврата отсутствует, при этом качественно поведение групповых скоростей фононных мод в исследуемых кристаллах похоже.

В разделе 4.4 описана модель, позволяющая учесть эффект фононной фокусировки в теплопроводности. Считая образец достаточно большим, можно перейти от суммирования фононов к интегрированию по всем волновым векторам в полном телесном угле. Для рассматриваемых кристаллов верхняя граница температур, при которых это приближение допустимо, составляет десятки кельвин, соответственно, можно перейти к линейному закону дисперсии фононов $\omega(\vec{k}j) = s(\vec{k}j)k$. С учетом этих допущений можно вывести следующую формулу низкотемпературной теплопроводности бесконечно длинного упруго анизотропного кристалла:

$$\kappa = \frac{C_v v_D^3}{24\pi A} \sum_j \int_{\Omega} \frac{I(\vec{k}j)}{s^3(\vec{k}j)} d\Omega. \quad (2)$$

В разделе 4.5 описанная модель применена для расчета теплопроводности образцов в форме стержней с круглым и прямоугольным поперечным сечением. Для вычисления теплопроводности конкретного образца нужно определить значение интеграла I , зависящее от его геометрии. Так, в случае круглого образца оно составляет:

$$I_o(\vec{k}j) = \frac{16R^3}{3} \frac{v_3^2(\vec{k}j)}{v_1(\vec{k}j)}, \quad (3)$$

где $v_3(\vec{k}j)$ — составляющая групповой скорости в направлении оси стержня, $v_1(\vec{k}j)$ — составляющая групповой скорости, лежащая в сечении образца, а R

— радиус образца. Кроме того, чтобы учесть конечную длину образца, нужно уменьшить величину теплопроводности за счет поправки на длину.

Зависимости величины теплопроводности от направления относительно оси были вычислены для образцов круглого сечения диаметром $D = 3$ мм и длиной $L = 30$ мм. Результат этих вычислений и вклад различных мод проиллюстрированы на рисунке 3 как зависимость коэффициента усиления $A_k = \kappa/\kappa_C$, где κ_C — изотропная величина теплопроводности по Казимиру, от ориентации оси образца. Видно, что качественно зависимости теплопроводности от направления для всех рассматриваемых кристаллов похожи. Во всех кристаллах наблюдается подавление теплопроводности в направлениях вдоль оси c и перпендикулярно ей и рост теплопроводности в направлении около 45° к оси c .

Основной вклад в общее значение теплопроводности вносят более медленные поперечные моды, поскольку вклад в теплопроводность обратно пропорционален квадрату фазовой скорости моды. Вклад моды L во всех материалах лежит в диапазоне 10–20%, а вклады мод T1 и T2 близки и составляют порядка 40–45%. При этом анизотропия теплопроводности в основном обусловлена фокусировкой моды T2 в направлении θ_2 , хотя он несколько скомпенсирован дефокусировкой моды L в близком направлении θ_6 . В направлении оси c поперечные моды T1 и T2 дефокусированы, что приводит к уменьшению значения теплопроводности несмотря на сфокусированную моду L. Перпендикулярно же оси c сфокусирована не только продольная мода, но и поперечная T1, что приводит к тому, что теплопроводность в базальной плоскости оказывается больше, чем вдоль оси c .

Численные значения изотропной величины теплопроводности и коэффициента усиления A_k для ряда направлений приведены в таблице 1. Материалы с более тяжелыми атомами ожидаемо обладают большей величиной теплопроводности, чем с легкими, из-за их более высокой теплоемкости и более низкой температуры Дебая.

Все исследуемые материалы (кроме AlN) проявляют ребро возврата в поверхности групповой скорости. Наиболее широкое оно в SiC, порядка 13° , и наиболее узкое в InN, менее 2° . Поверхность групповой скорости моды T2 в AlN в окрестности θ_2 не обладает ребром возврата, поэтому в нем не так резко

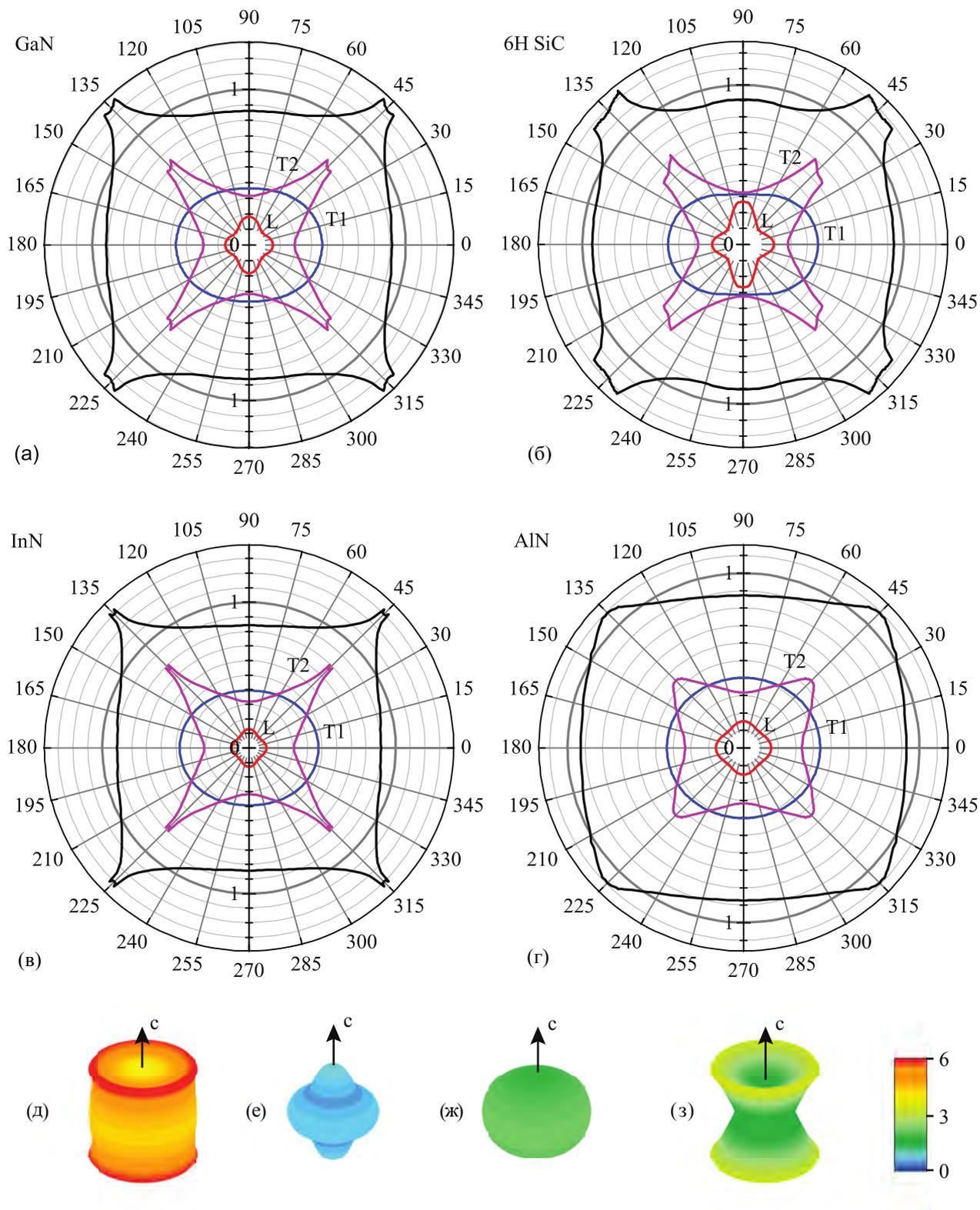


Рис. 3 — Угловая зависимость нормированного значения теплопроводности и вклады различных мод с учетом эффекта фоновой фокусировки для образцов круглого сечения диаметром 3 мм и длиной 30 мм (а) GaN, (б) 6H-SiC, (в) InN, (г) AlN. Поверхности полной теплопроводности (д) и вкладов мод L (е), T1 (ж), T2 (з) в случае GaN (шкала справа дает значения теплопроводности в $\text{Вт м}^{-1} \text{К}^{-1}$ при температуре 1 К).

возрастает теплопроводность в этом направлении, лишь на 25% по сравнению со значением теплопроводности вдоль оси c .

Следует отметить, что во всех материалах наблюдается выделенное направление вблизи 60° к оси c , где вклады обеих поперечных под сравниваются друг с другом, а величина теплопроводности с учетом фононной фокусировки становится равна изотропной величине. Вторым эффектом наблюдается во всех на данный момент исследованных с точки зрения фононной фокусировки кристаллах (см. таблицу VI в работе [8]).

В случае стержня прямоугольного сечения со сторонами D и nD интеграл I равен

$$\begin{aligned} I_{\square}(\vec{k}j) &= \frac{D^3 v_3^2(\vec{k}j)}{3 v_1(\vec{k}j)} \frac{3n \sin \phi - \cos \phi}{\sin^2 \phi}, \tan \phi > \frac{1}{n} \\ &= \frac{D^3 v_3^2(\vec{k}j)}{3 v_1(\vec{k}j)} \frac{3n^2 \cos \phi - n^3 \sin \phi}{\cos^2 \phi}, \tan \phi < \frac{1}{n}, \end{aligned} \quad (4)$$

где ϕ — угол между $v_1(\vec{k}j)$ и стороной образца с размером nD .

В случае образца с прямоугольным сечением теплопроводность с учетом эффекта фононной фокусировки зависит также от ориентации его боковых сторон, поскольку образец меньшей толщины хуже «чувствует» локальные особенности фононной фокусировки. Для подтверждения результатов метода вычисленная с его помощью теплопроводность кристаллов AlN и SiC сопоставлена с экспериментальными данными. Полученные таким образом зависимости близки друг к другу.

Кристалл	k_C	Коэффициент усиления A_k		
		0	45	90
GaN	4.71	0.884	1.246	0.91
6H SiC	1.65	0.908	1.246	0.936
InN	10.61	0.842	1.322	0.899
AlN	2.15	0.874	1.089	0.925

Таблица 1 — Значения изотропной величины теплопроводности k_C при температуре 1 К и коэффициента усиления A_k для ряда направлений в случае образцов круглого сечения диаметром 3 мм и длиной 30 мм. Углы указаны относительно кристаллографической оси c .

Таким образом, вычислено влияние фононной фокусировки в режиме граничного рассеяния на теплопроводность гексагональных политипов широкзонных полупроводниковых материалов, а именно 4H-, 6H-SiC и GaN, AlN, InN типа вюрцита. Показано, что фононная фокусировка приводит к возникновению анизотропии теплопроводности во всех этих материалах, вызывая сильный ее рост в направлении примерно 45° к кристаллографической оси c и приводя к тому, что величина теплопроводности вдоль оси c меньше, чем перпендикулярно ей. Наибольший вклад в величину теплопроводности вносят поперечные фононные моды T1 и T2, при этом общая анизотропия в основной возникает из-за вклада моды T2, обусловленного ее сильной фокусировкой. Для всех исследованных материалов в направлении примерно 60° к оси c величина теплопроводности с учетом фононной фокусировки равна изотропной величине теплопроводности, причем то же имеет место для всех кристаллов с гексагональной решеткой. Обнаружено, что в случае AlN величина анизотропии теплопроводности в силу фононной фокусировки минимальна, поскольку в его случае не присутствует особенностей в поверхностях групповых скоростей фононных мод. Кратко проиллюстрировано влияние ориентации граней образца в форме параллелепипеда на его теплопроводность.

Пятая глава посвящена измерению теплопроводности объемных кристаллов AlN и GaN в широком диапазоне температур от 5 К до 410 К и анализу полученных результатов путем сравнения с результатами теоретических расчетов.

В разделе 5.1 приведены и проанализированы результаты измерений теплопроводности объемных монокристаллических образцов AlN. По данным вторичной ионной масс-спектрометрии в образцах присутствуют примесные атомы углерода, кислорода и кремния в концентрациях $[C] \approx 5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $[O] \approx 6 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $[Si] \approx 5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Концентрация парамагнитных дефектов в образцах была определена при помощи измерения их намагниченности на СКВИД-магнитометре Quantum Design MPMS XL-7 в диапазоне температур от 2 до 300 К в магнитных полях до 7 Тл при ориентации в базальной плоскости и составила $(1-3) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. При помощи спектрометра LabRam HR800 (Horiba Jobin-Yvon) был снят спектр комбинационного рассеяния света, полученные значения пиков соответствуют чистому недеформированному

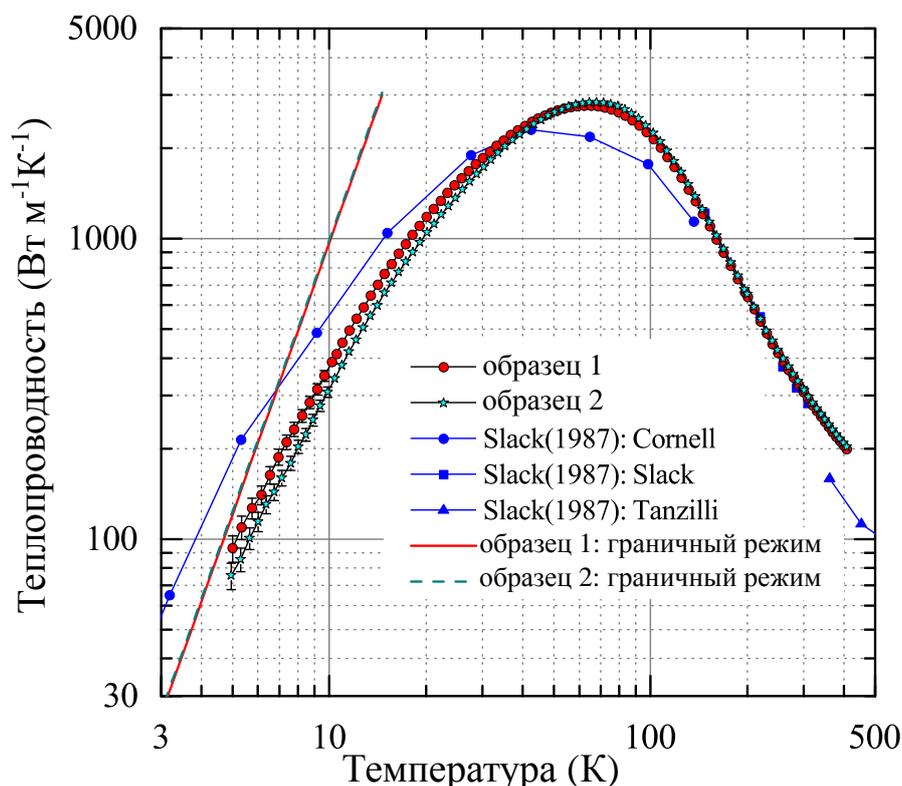


Рис. 4 — Зависимость теплопроводности монокристаллов нитрида алюминия от температуры. Экспериментальные данные для образца 1 обозначены красными кружками, для образца 2 — голубыми звездами. Для сравнения синими символами обозначены данные из работы [5]. Для всех температур выше 10 К величина погрешности меньше размера символа. Сплошная красная и пунктирная зеленая линии показывают расчетное значение величины теплопроводности образцов 1 и 2 соответственно в режиме граничного рассеяния с учетом эффекта фононной фокусировки.

монокристаллу AlN и показывают, что концентрация свободных носителей заряда в образцах них пренебрежимо мала.

Теплопроводность двух образцов (1 и 2) в форме параллелепипедов с размерами $5.6 \times 2.94 \times 0.62 \text{ мм}^3$ и $6.6 \times 3.0 \times 0.63 \text{ мм}^3$ соответственно была измерена при помощи метода продольного теплового потока. Образцы были вырезаны из двух монокристаллов нитрида алюминия, длинная грань лежала в базальной плоскости. Погрешность при измерении теплопроводности меньше 3% и увеличивается в диапазоне низких температур.

Измеренные значения теплопроводности для образцов нитрида алюминия представлены на рисунке 4. Схожесть данных, полученных в двух независимых экспериментах, позволяет предположить, что вклад рассеяния фононов на точечных дефектах в теплопроводность невелик при температурах выше 150 К. Измеренные величины теплопроводности при комнатной температуре (298 К) составляют 310 и 316 $\text{Вт м}^{-1} \text{К}^{-1}$, что всего на 1–3% меньше, чем предполагали теоретические вычисления для теплопроводности

чистого кристалла в работе [5] и на 2–4% меньше, чем получено в результате вычислений из первых принципов в работе [9]. Видно, что с учетом анизотропии теплопроводности, полученные данные хорошо согласуются с теорией в диапазоне температур более 150 К.

При уменьшении температуры ниже 150 К экспериментальные данные начинают все больше отклоняться вниз от теоретических, что показывает растущее влияние процессов рассеяния фононов на дефектах кристаллической решетки и на границах образца. Максимум теплопроводности достигается для образца 1 при температуре 64 К и составляет $2770 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$, для образца 2 — при 67 К и составляет $2840 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$. Эти значения превышают полученные ранее для нитрида алюминия, но сильно уступают теоретическому предсказанию для идеального кристалла ($70000 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ при температуре 30 К). Полный переход в режим граничного рассеяния происходит при температурах менее 5 К.

Вычисленная с учетом фононной фокусировки величина теплопроводности в базальной плоскости составляет 0.965 и 0.987 $\text{Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ для образцов 1 и 2 соответственно при температуре 1 К, что на 3–4% меньше, чем в изотропном случае. Соотношение продольной и поперечной компонент теплопроводности равно 1.04. Вычисленные зависимости показаны при помощи прямых линий на рисунке 4. Видно, что при температуре 5 К экспериментальные данные лежат ниже теоретических примерно на 30%. Это означает, что граничное рассеяние начинает играть определяющую роль в образцах нитрида алюминия лишь при очень низких температурах.

Таким образом, рассеяние фононов на дефектах вносит значительный вклад в теплопроводность исследованных образцов уже при температурах от 5 К и выше, причем этот вклад растет с температурой и доминирует над другими типами фононного рассеяния при температурах вблизи максимума теплопроводности. Обращает на себя внимание и асимметрия максимума теплопроводности. В случае рассеяния фононов на идеальных точечных дефектах, изотопах, пик теплопроводности остается симметричным и смещается в область более низких температур. Наблюдается противоположная картина — пик теплопроводности становится ассиметричным и смещается вверх. Такое необычное поведение теплопроводности предположительно связано с сильным влиянием фононного рассеяния на носителях заряда (электронах

или дырках), связанных с нейтральными примесными центрами. В области высоких температур, когда частота существенных фононов больше пороговой частоты ω_{co} , оно практически не вносит вклада в величину теплопроводности.

Пороговая частота ω_{co} определяется величиной борковского радиуса носителя заряда, связанного с примесным центром. Если длина волны фонона меньше, чем два боровских радиуса, то такой фонон не будет взаимодействовать со связанным носителем заряда. Поскольку при некоторой температуре энергия существенных фононов больше, чем $k_B T$, то температура, выше которой исчезает эффект этого рассеяния, составляет $T_{co} \approx \pi \hbar v_D / (k_B a_B)$. Для борковского радиуса характерных примесей в нитриде алюминия, равного приблизительно 15 \AA , T_{co} равна 110 К, что хорошо согласуется с полученным результатом. Максимальное влияние этот эффект оказывает, когда длины волн существенных фононов превышают два боровских радиуса. Считая, что их энергии $\leq 5k_B T$, максимум этого рассеяния наступает при $T_{co}/5 = 22 \text{ К}$. При уменьшении температуры его вклад стремительно падает как четвертая степень частоты фонона, так что при достаточно низких температурах доминирующим источником рассеяния фононов становится граничное рассеяние, что и показывают экспериментальные данные.

Теплопроводность образца 2 при температурах ниже максимума теплопроводности меньше, чем у образца 1, хотя последний обладает большим значением в максимуме. Соотношение теплопроводности образцов растет с уменьшением температуры и при температуре 5 К составляет 1.2. Этот результат можно объяснить тем, что в образце 2 концентрация примесных центров выше, чем в образце 1. Величина фононного рассеяния на связанных носителях заряда связана не с общей концентрацией примесей, а с числом нейтральных примесей. Скорее всего, в нитриде алюминия примесные центры, демонстрирующие парамагнитный характер, ответственны за рассеяние фононов на связанных с ними носителях заряда. Концентрация этих центров на порядок величины меньше концентраций примесных кислорода и углерода. Наиболее вероятно, что этими центрами являются парамагнитные вакансии азота и примесные атомы кислорода.

Раздел 5.2 посвящен измерению теплопроводности GaN в широком диапазоне температур от 5 К до 410 К. Монокристаллическая прозрачная и бесцветная пластина GaN типа вюрцита толщиной примерно 1.5 мм была вы-

ращена методом хлор-гидридной газофазной эпитаксии (HVPE) на двухдюймовой сапфировой пластине и самоотделилась от нее при охлаждении. Плотность дислокаций на верхней поверхности пластины составляет $\sim 10^6 \text{ см}^{-2}$. Общая концентрация примесей — порядка $3 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Для проведения измерений теплопроводности из пластины был вырезан образец в форме параллелепипеда длиной 6.5 мм с поперечным сечением $1.38 \times 3.24 \text{ мм}^2$. Две из его боковых граней получены при помощи лазерной резки, а еще две — сколом. Длинные грани образца лежат в кристаллографической плоскости (0001). Погрешность измерений лежит в пределах 2–3% в основном диапазоне и возрастает в несколько раз при достижении низких температур (5–6 К).

Рамановская спектроскопия была проведена на приборе ИНТЕГРА Спектра при комнатной температуре. Полученные положения рамановских пиков соответствуют характерным значениям для чистого кристалла GaN. Поскольку продольные оптические колебания образуют совместную фонон-плазмонную LPP-моду со свободными носителями заряда, из рамановского спектра можно оценить плотность свободных носителей заряда в образце $n_e = (2.7 \pm 0.2) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Концентрация парамагнитных дефектов, равная $(2.6 \pm 0.1) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, была определена при помощи измерения намагниченности. Примечательно, что она очень близка к концентрации свободных носителей заряда. Предположительно примесные кислород и кремний, являясь мелкими донорами в GaN, ответственны за возникновение как парамагнетизма при низких температурах, когда они заряжены нейтрально, так и за присутствие свободных носителей заряда при высоких температурах.

Измеренная температурная зависимость теплопроводности монокристалла нитрида галлия в базальной плоскости представлена на рис. 5 вместе с экспериментальными данными других работ [1; 6; 10–12]. В области высоких температур наклоны зависимостей теплопроводности отличаются. Так, измерения показывают $\kappa(T) \propto T^{-n}$, где $n = 1.358 \pm 0.002$ в диапазоне температур от 60 К до 410 К. В то же время в работе [10] наблюдалась более слабая зависимость: $n = -1.22$ в диапазоне температур $80 < T < 300 \text{ К}$.

В области же самых низких температур (вблизи и ниже 5.5 К) измеренные значения теплопроводности близки к вычисленным для кристалла этих размеров в режиме граничного рассеяния (показанным на рисунке фио-

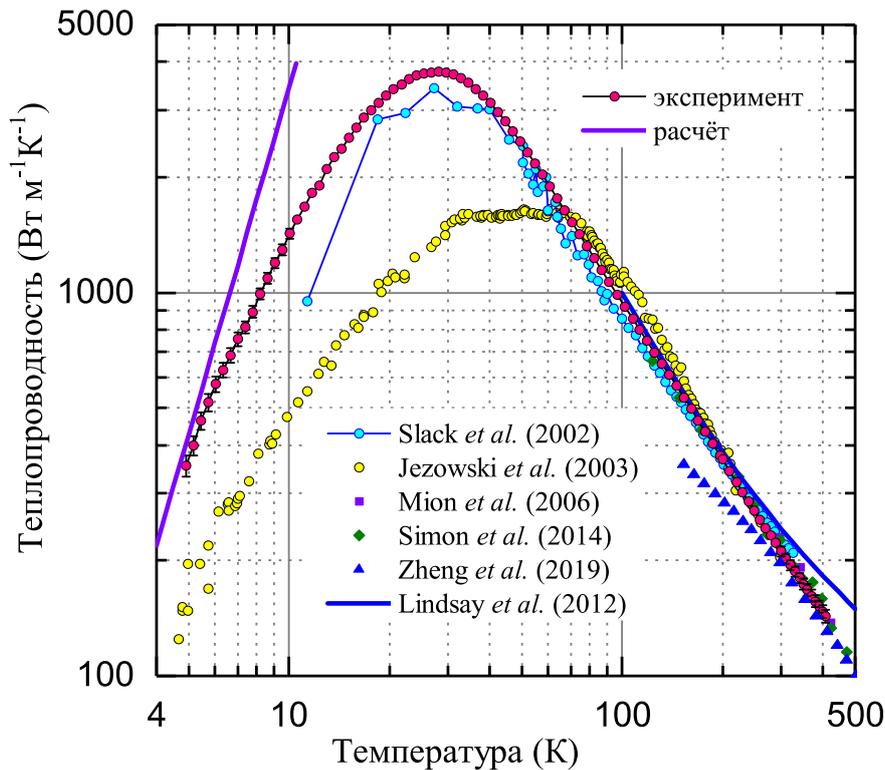


Рис. 5 — Теплопроводность монокристаллического GaN в зависимости от температуры. Розовые круги — измеренные данные, фиолетовая линия — вычисленная зависимость теплопроводности в режиме граничного рассеяния с учетом эффекта фоновой фокусировки. Погрешности эксперимента не превышают размеров символов выше 10 К и ниже 300 К. Кроме того, показаны результаты экспериментов [1; 6; 10–12].

летовой линией). Величина анизотропии теплопроводности в нитриде галлия достаточно мала, так, при тепловой длине в 5.6 мм расчетная теплопроводность образца вдоль оси c и поперек нее отличается лишь на 0.5%. Измеренная величина теплопроводности при температуре 5 К примерно на 13% меньше вычисленной. Это означает, что даже при этой температуре рассеяние фононов на точечных дефектах ощутимо уменьшает величину теплопроводности в исследуемом образце. При увеличении температуры экспериментальная кривая все сильнее уходит вниз, что отражает рост силы рассеяния на точечных дефектах по сравнению с граничным рассеянием.

Максимум величины теплопроводности в исследуемом образце достигается при температуре 28 К и составляет $3770 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$, что превышает полученные в предыдущих экспериментах. Значение теплопроводности в максимуме определяется сочетанием рассеяния фононов на границе, точечных дефектах и фонон-фононных процессов, и именно последние ответственны за отрицательный наклон зависимости теплопроводности выше максимума.

В области высоких температур сравнение с первопринципными вычислениями [13] показывает хорошее согласие (в пределах 4–5%) от 100 до 200 К. При температурах выше теория отклоняется вверх примерно на 14% при температуре 300 К и 25% при 400 К. Это различие может возникать из-за вклада процессов фононного рассеяния высокого порядка, не учтенного в теоретических расчетах. При величине боровского радиуса примесного атома кислорода в нитриде галлия $a_B = 27.7 \text{ \AA}$ максимум рассеяния фононов на электронах, связанных с примесными атомами кислорода достигается при 8 К. В экспериментальных данных вблизи нее наблюдается небольшая особенность, что подтверждает влияние носителей заряда, связанных с примесными атомами, на величину теплопроводности при низких температурах в нитриде галлия наряду с нитридом алюминия.

В результате исследования теплопроводности объемных монокристаллов нитридов алюминия и галлия впервые были получены точные данные об их теплопроводности в широком диапазоне температур, включая самые низкие, где наблюдается переход в режим граничного рассеяния и величина теплопроводности хорошо совпадает с расчетом с учетом фононной фокусировки величинами. В области высоких температур (выше пика температурной зависимости теплопроводности) наблюдается очень хорошее согласие между расчетом из первых принципов и экспериментом даже с учетом того, что концентрация примесей в образцах AlN, составляющая в сумме $1.2 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, на порядок величины больше, чем в образце GaN ($3 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$). Это свидетельствует о том, что рассеяние на примесях с концентрацией порядка и менее 10^{19} см^{-3} относительно слабо влияет на теплопроводность этих кристаллов. При этом отклонение от расчетной зависимости в области высоких температур для GaN показывает, что в этом материале активен другой вид фононного рассеяния, вероятнее всего в этой роли выступают четырехфононные фонон-фононные процессы. Следует отметить, что в обоих кристаллах наблюдается дополнительное рассеяние в области низких температур около 22 К в AlN и 8 К в GaN. Наиболее вероятным процессом, вызывающим его, является рассеяние на носителях заряда, связанных с примесными атомами. В то время как в GaN это рассеяние при имеющейся концентрации примесей довольно слабо, в AlN оно вплоть до самых низких температур не дает

теплопроводности достичь предельных значений, обусловленных граничным рассеянием фононов.

В **заключении** сформулированы выводы и основные результаты диссертации.

ВЫВОДЫ

1. Создана установка для проведения измерений теплопроводности методом «3-омега» в автоматическом режиме. Ее апробация проведена при помощи измерения теплопроводности объемных образцов сапфира. Показано хорошее согласование экспериментальных результатов со справочными данными и с данными, полученными методом продольного теплового потока.

2. Показано, что теплопроводность гексагональных полупроводниковых кристаллов в режиме граничного рассеяния анизотропна из-за эффекта фононной фокусировки. Теплопроводность падает в направлении основных кристаллографических осей и растет в направлении 45 градусов к оси *c*. В основном такое поведение обусловлено существованием ребра возврата в поверхности групповой скорости медленной квазипоперечной моды T₂.

3. Измерена теплопроводность слоев, составляющих гетероструктуру GaN/Al_{*x*}Ga_{1-*x*}N на сапфире при температурах от 295 К до 330 К. Анализ этих данных в рамках моделей Каллуэя и виртуального кристалла позволяет заключить, что с точки зрения тепловых свойств справедливо приближение набора слоев Al_{*x*}Ga_{1-*x*}N с разным содержанием алюминия эффективным слоем той же толщины со средневзвешенной массовой долей *x*. В результате моделирования теплопереноса в структуре определено, что при толщине слоя GaN в 3.6 мкм общее тепловое сопротивление структуры минимально.

4. Измерена теплопроводность объемных кристаллов GaN и AlN при температурах от 5 К до 410 К. Получены наибольшие из когда-либо измеренных значений теплопроводности для этих материалов в широком температурном диапазоне. Экспериментальные величины в режиме граничного рассеяния при температурах ниже 5.5 К хорошо согласуются с рассчитанными теоретически с учетом эффекта фононной фокусировки. Особенности температурной зависимости теплопроводности демонстрируют влияние рассеяния фононов на связанных с легирующими примесями носителях заряда в этих материалах.

Публикации автора по теме диссертации

1. **Chernodubov D. A.**, Inyushkin A. V. Automatic thermal conductivity measurements with 3-omega technique // Rev. Sci. Instrum. — 2019. — Vol. 90, no. 2. — P. 024904.
2. **Chernodubov D. A.**, Inyushkin A. V. Phonon focusing effect on thermal conductivity of hexagonal group III-nitrides and silicon carbide crystals // Phys. Lett. A. — 2020. — Vol. 384, no. 5. — P. 126120.
3. **Чернодубов Д. А.**, Майборода И. О., Занавескин М. Л., Инюшкин А. В. Особенности теплопереноса в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ на сапфире // Физика твердого тела. — 2020. — Т. 62, no 4. — С. 635–639.
4. Inyushkin A. V., Taldenkov A. N., **Chernodubov D. A.**, Mokhov E. N., Nagalyuk S. S., Ralchenko V. G., and Khomich A. A. On the thermal conductivity of single crystal AlN // J. Appl. Phys. — 2020. — Vol. 127, no. 20. — P. 205109.
5. Inyushkin A. V., Taldenkov A. N., **Chernodubov D. A.**, Voronenkov V. V., and Shreter Y. G. High thermal conductivity of bulk GaN single crystal: An accurate experimental determination // Письма в ЖЭТФ. — 2020. — Т. 112, no. 2. — С. 112–113.

Список литературы

1. *Mion C., Muth J., Preble E., Hanser D.* Accurate dependence of gallium nitride thermal conductivity on dislocation density // Appl. Phys. Lett. — 2006. — Vol. 89, no. 9. — P. 092123.
2. *Liu W., Balandin A. A.* Thermal conduction in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys and thin films // J. Appl. Phys. — 2005. — Vol. 97, no. 7. — P. 073710.
3. *Abeles B.* Lattice thermal conductivity of disordered semiconductor alloys at high temperatures // Phys. Rev. — 1963. — Vol. 131. — P. 1906.
4. *Klemens P. G.* Thermal Conductivity and Lattice Vibrational Modes // Solid State Physics. Vol. 7 / ed. by F. Seitz, D. Turnbull. — New York : Academic Press, Inc., 1958. — P. 1–98.

5. *Slack G. A., Tanzilli R. A., Pohl R., Vandersande J.* The intrinsic thermal conductivity of AlN // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1987. — Vol. 48, no. 7. — P. 641–647.
6. *Jeżowski A., Danilchenko B., Boćkowski M., Grzegory I., Krukowski S., Suski T., Paszkiewicz T.* Thermal conductivity of GaN crystals in 4.2–300 K range // *Solid State Commun.* — 2003. — Vol. 128, no. 2/3. — P. 69–73.
7. *Най Д.* Физические свойства кристаллов: Их описание при помощи тензоров и матриц: Пер. с англ. — Москва : Мир, 1967.
8. *McCurdy A. K.* Phonon focusing and phonon conduction in hexagonal crystals in the boundary-scattering regime // *Phys. Rev. B.* — 1974. — Vol. 9. — P. 466–480.
9. *Lindsay L., Broido D., Reinecke T.* Ab initio thermal transport in compound semiconductors // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87, no. 16. — P. 165201.
10. *Slack G. A., Schowalter L. J., Morelli D., Freitas Jr J. A.* Some effects of oxygen impurities on AlN and GaN // *J. Crys. Growth.* — 2002. — Vol. 246, no. 3/4. — P. 287–298.
11. *Simon R. B., Anaya J., Kuball M.* Thermal conductivity of bulk GaN—Effects of oxygen, magnesium doping, and strain field compensation // *Appl. Phys. Lett.* — 2014. — Vol. 105, no. 20. — P. 202105.
12. *Zheng Q., Li C., Rai A., Leach J. H., Broido D. A., Cahill D. G.* Thermal conductivity of GaN, GaN⁷¹, and SiC from 150 K to 850 K // *Phys. Rev. Mater.* — 2019. — Vol. 3, no. 1. — P. 014601.
13. *Lindsay L., Broido D., Reinecke T.* Thermal conductivity and large isotope effect in GaN from first principles // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 109, no. 9. — P. 095901.