

05

## Условие конвекции элементарных возбудений в кристаллических твердых телах

© К.К. Казбеков, Ж.Х. Мурлиева, Д.К. Палчаев

Дагестанский государственный университет, Махачкала

E-mail: dairpalchaev@mail.dgu.ru

Поступило в Редакцию 21 января 2003 г.

Обнаружен универсальный метод эмпирической оценки значений кинетических коэффициентов в уравнениях переноса квазичастиц в кристаллических структурах. Метод основан на критерии возникновения конвекции Ландау, а также результатах анализа экспериментальных данных по электро- и теплосопротивлению и коэффициенту теплового расширения веществ с различным типом межатомной связи.

Кинетические коэффициенты в уравнениях переноса являются сложными функциями температуры. Они определяются не только различными вкладами в проводимость соответствующих элементарных возбудений, но и различными вкладами в рассеяние этих возбудений. При этом изменения величин кинетических коэффициентов на многие порядки от  $T = 0$  К до температуры плавления кристаллов обусловлены рассеянием квазичастиц на фононах.

Одним из наиболее значимых достижений теории переноса в конденсированных средах является разработка способа получения (см., например, [1]) кинетических коэффициентов, минуя уравнение переноса. При этом формальные выражения этих коэффициентов являются точными решениями кинетических уравнений, особенность которых заключается в том, что коэффициенты связываются с корреляционной функцией потоков в равновесном состоянии [2,3]. В явном виде кинетические коэффициенты даются, в первом приближении, по отклонениям оператора плотности от равновесного состояния в виде формулы Кубо [2–4]. Однако расшифровка формальных выражений с целью получения однозначной физической интерпретации сопряжена с серьезными трудностями [2,4]. В связи с этим в ряде случаев,

преимущественно для кристаллических систем, единственно доступным способом расчета кинетических коэффициентов является вариационный метод, основанный на решении кинетического уравнения [5]. Решение линеаризованного кинетического уравнения ищут исходя из феноменологического уравнения переноса.

В обычной неравновесной термодинамике плотность потока  $\mathbf{j}$  пропорциональна градиенту внешнего поля  $Y$

$$\mathbf{j} = -\sigma \text{grad} Y, \quad (1)$$

где  $\sigma$  — соответствующий кинетический коэффициент. В частности, для кристаллических структур физический поток можно рассматривать как тепловую диффузию квазичастиц — элементарных квантовых возбуждений среды. При любой конечной температуре совокупность квазичастиц является почти идеальным газом возбуждений, в котором взаимодействие препятствует их спонтанной конвекции [6]. В случае достаточно плотного газа квазичастиц (когда среду можно рассматривать как сплошную) критерий возникновения конвекции можно записать через условие Ландау [7]

$$dS/dx = 0, \quad (2)$$

где  $S$  — энтропия рассматриваемой подсистемы частиц, изменяющаяся по линейному параметру  $x$  системы. В общем случае  $S$  является функцией потенциала внешнего поля, температуры и давления. При заданной температуре  $T$  энтропия  $S = S(Y, P)$ . Тогда условие (2) представляется как [7]

$$\frac{dS}{dx} = \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_P \left( \frac{\partial T}{\partial Y} \right)_P \frac{dY}{dx} + \frac{g}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = 0. \quad (3)$$

Так как мы рассматриваем кристаллы, то изменение объема подсистемы может быть связано только с изменением атомного объема системы. Поэтому фигурирующий в (3) комплекс  $1/V(\partial V/\partial T)_P$  представляет собой коэффициент теплового расширения кристалла (КТР). Динамическое взаимодействие между частицами газа учитывается в (3) в виде силового параметра  $g$  (см. [7]), имеющего размерность ускорения. Таким образом, с учетом известных термодинамических соотношений

условие (3) можно записать в виде

$$-\frac{dY}{dx} = \frac{g}{c_p t_Y} \beta T, \quad (4)$$

где  $c_p$  — удельная теплоемкость данной системы,  $t_Y \equiv (\partial T / \partial Y)_P$  — фактор температурного согласования, учитывающий изменения температуры кристалла под действием внешнего поля. Условие наличия конвекции (4), с учетом уравнения переноса (1), позволяет найти феноменологическое выражение для соответствующих усредненных значений кинетических коэффициентов  $\sigma_i$

$$\sigma_i^{-1} \equiv R_i = \left( \frac{g}{j c_p t_Y} \right)_i \beta T. \quad (5)$$

В частности, когда  $\beta T \rightarrow 1$ , согласно тому же условию (2), сопротивление  $i$ -й подсистемы  $R_i$  является характеристическим

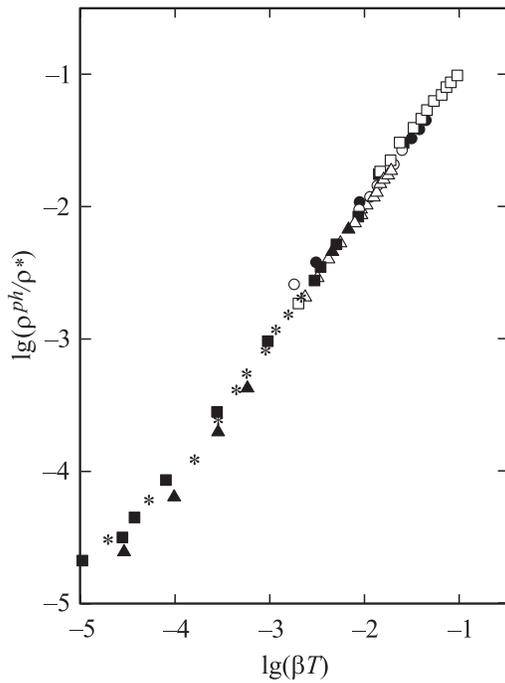
$$R_i^* = \left( \frac{g}{j c_p t_Y} \right)_i^*. \quad (6)$$

Формула (5) позволяет сделать важный вывод, согласно которому

$$\frac{R_i}{R_i^*} = \beta T, \quad (7)$$

т.е. приведенное сопротивление подсистем в кристаллах является универсальной функцией, непосредственно связанной с решеткой кристалла. Подтверждение этого результата можно продемонстрировать на двух наглядных примерах — электросопротивлении металлов и теплосопротивлении диэлектриков. Процессы переноса газа фермионов (электронов в металлах) и бозонов (фононов в неметаллических кристаллах) удовлетворяют модели конвективного переноса заряда и тепла при не равном нулю градиенте электрического потенциала и температуры соответственно. Причем особо ценными при экспериментальном обосновании утверждения (7) могут быть результаты исследования температурных зависимостей кинетических коэффициентов и КТР одних и тех же объектов в одном и том же эксперименте.

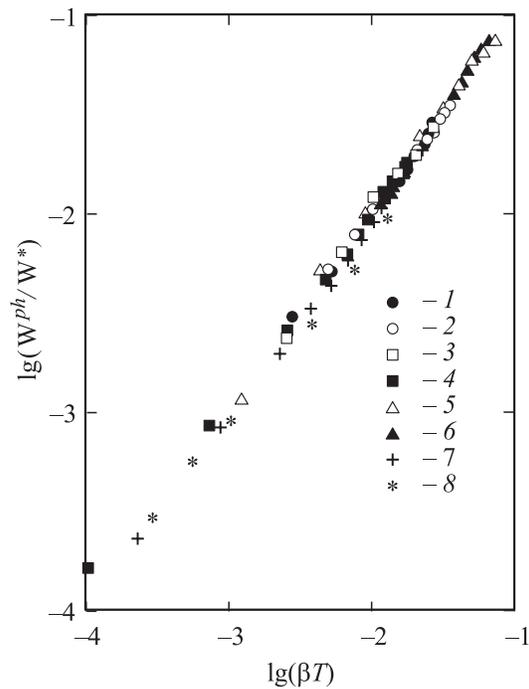
Электросопротивление и коэффициент теплового расширения металлов из различных групп таблицы элементов Менделеева — Cu,



**Рис. 1.** Корреляция электросопротивления и изобарной термической деформации для меди по данным разных авторов из [8].

Zn, Al, Pb в интервале от 100 до 500 К нами измерялись на одних и тех же образцах, в одних и тех же условиях. Указанный интервал температур охватывает область выше и ниже температуры Дебая, в котором электросопротивление пропорционально  $T^n$ , где  $n$  изменяется от  $\sim 3$  до 1, и обычно описывается интерполяционной формулой Блоха–Грюнайзена [4].

Исследования проводились на установке, представляющей собой кварцевый dilatометр с фотоэлектрической регистрацией сигнала перемещения. Образцы снабжались дополнительно токовводами. Одноименные провода хромель-алюмелевых термопар, закрепленные в двух точках вдоль образца, служили потенциальными зондами. Суммарные погрешности измерения удельного электросопротивления и КТР не превышали 0.5 и 3% соответственно.



**Рис. 2.** Корреляция теплосопrotивления и изобарной термической деформации: 1 — KCl (0.997; 60 ÷ 300 K), 2 — NaCl (0.999; 80 ÷ 300 K), 3 — SiO<sub>2</sub> (0.996; 100 ÷ 600 K); 4 — SiC (0.998; 200 ÷ 1200 K), 5 — MgO (0.995; 120 ÷ 1600 K), 6 — BeO (0.998; 573 ÷ 1673 K), 7 — Si (0.999; 120 ÷ 1100 K), 8 — алмаз (0.998; 150 ÷ 1000 K).

Анализ полученных данных показал, что электросопротивление и изобарная термическая деформация всех изученных металлов связаны линейными зависимостями с коэффициентами корреляции, близкими к 1. Соответствующие уравнения имеют вид:

$$\text{для меди} \quad \rho = -0.0412 \cdot 10^{-8} + 1.184 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T, \quad r = 0.9990, \quad (8)$$

$$\text{для цинка} \quad \rho = 0.0396 \cdot 10^{-8} + 2.23 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T, \quad r = 0.9995, \quad (9)$$

$$\text{для алюминия} \quad \rho = 0.123 \cdot 10^{-8} + 1.27 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T, \quad r = 0.9995, \quad (10)$$

$$\text{для свинца} \quad \rho = 0.439 \cdot 10^{-8} + 8.14 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T, \quad r = 0.9990. \quad (11)$$

Первые слагаемые соответствуют рассеянию электронов на статических дефектах, а вторые — на фононах  $\rho^{ph}$ . Линейные коэффициенты в уравнениях (8)–(11) суть характеристические электросопротивления  $\rho^*$  — предел, к которому стремится фоновое электросопротивление при  $\beta T \rightarrow 1$ . Такие же зависимости наблюдаются при низких и высоких температурах. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведена корреляция  $\rho^{ph}/\rho^*$  и  $\beta T$  для меди по данным  $\rho$  различных авторов из работы [8]. Данные по тепловому расширению взяты из [9]. Из  $\sim 200$  зависимостей электросопротивления от температуры в [8] были выбраны те, которые охватывали наибольшие и различные интервалы температур от  $\sim 20$  К до температуры плавления — 1357 К. Коэффициенты корреляций для всех результатов не меньше 0.999. В области температур ниже  $\sim 20$  К корреляция ниже, видимо из-за конкуренции электрон-фононного и межэлектронного механизмов столкновений [10]. Линейная связь электросопротивления с изобарной термической деформацией наблюдается [11] и для переходных металлов, причем как выше, так и ниже температуры Кюри.

Анализ экспериментальных данных по теплосопотивлению  $W$  и коэффициенту теплового расширения из справочных изданий [9,12–16], в том числе наших данных по кремнию [16], приводит к аналогичным зависимостям фононного теплосопотивления  $W^{ph}$  от  $\beta T$  неметаллических монокристаллов. На рис. 2 приведены результаты корреляционного анализа  $W^{ph}/W^*$  и  $\beta T$  в широкой области температур для веществ с различным типом межатомной связи. В скобках указаны соответствующие коэффициенты корреляций и интервалы температур, для которых имелись надежные данные по  $W$  и  $\beta$ .

Таким образом, можно констатировать, что обобщенная модель конвективного переноса Ландау применима при переносе заряда электронами и тепла фононами.

## Список литературы

- [1] Kubo R. Lectures in Theoretical Physics. (Boulder Summer school) / Eds. Brittin Dunham. New York, 1959. P. 120.
- [2] Могилевский В.М., Чудновский А.Ф. Теплопроводность полупроводников. М.: Наука, 1972.
- [3] Таулес Д. Квантовая механика систем многих частиц. М.: Мир, 1975.
- [4] Займан Дж. Физика металлов. 1. Электроны. М.: Мир, 1972.

- [5] *Займан Дж.* Электроны и фононы. М.: Иностранная литература, 1962.
- [6] *Займан Дж.* Современная квантовая теория. М.: Мир, 1971.
- [7] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Гидродинамика. Т. VI. М.: Наука, 1986.
- [8] *Matula R.A.* // Phys. Chem. Ref. 1979. V. 8. P. 1147.
- [9] *Новикова С.И.* Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974.
- [10] *Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б.* Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984.
- [11] *Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К., Борзов Е.Д.* // ПЖТФ. 2002. Т. 28. В. 18. С. 48–52.
- [12] *Теплопроводность твердых тел* / Под ред. А.С. Охотина. М.: Энергоиздат, 1984.
- [13] *Кожевников И.Г., Новицкий Л.А.* Теплофизические свойства материалов при низких температурах. М.: Машиностроение, 1982.
- [14] *Акустические кристаллы* / Под ред. М.П. Шаскольской. М.: Наука, 1982.
- [15] *Кржижановский Р.Е., Штерн З.Ю.* Теплофизические свойства неметаллических материалов. Л.: Энергия, 1973.
- [16] *Палчаев Д.К., Батдалов А.Б., Мурлиева Ж.Х.* и др. // ФТТ. 2001. Т. 43. № 3. С. 442–445.