

УДК 539.2.01

© 1990

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ С ТЕРМАЛИЗОВАННЫМИ ДЕФЕКТАМИ

А. И. Морозов, А. С. Сигов

Изучена низкотемпературная теплопроводность металлов с квантовыми термализованными дефектами. Показано, что основной вклад в теплопроводность вносят электроны, рассеивающиеся на таких дефектах, и найдена температурная зависимость коэффициента теплопроводности κ . Исследовано влияние кластеризации дефектов на величину κ .

Легкие примеси внедрения в металлической матрице вследствие туннелирования сохраняют свою подвижность в области низких температур [1]. Как теоретические оценки [2], так и экспериментальные данные [3, 4] свидетельствуют в пользу того, что характерная ширина зоны ϵ_0 для водорода в металле составляет 0.1–10 К. Поэтому представляет несомненный интерес исследование процессов переноса в металлах, содержащих подвижные дефекты (примесоны).

Обычно при рассмотрении рассеяния электронов на примесях последние считают «замороженными» в определенных положениях. В этом случае они играют роль внешнего поля, действующего на электроны. Соответствующая «крестовая» техника вычисления времени примесного рассеяния приведена в [5].

Примесоны же следует рассматривать в качестве внутренних степеней свободы кристалла. Исследуем электрон-примесонное взаимодействие, пренебрегая пока взаимодействием примесонов между собой. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) a^+(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) c^+(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) + \\ + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_0(\mathbf{q}) a^+(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) c^+(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}'), \quad (1)$$

где $\epsilon(\mathbf{k})$ и $\omega(\mathbf{k})$ — законы дисперсии; $a^+(\mathbf{k})$, $a(\mathbf{k})$ и $c^+(\mathbf{k})$, $c(\mathbf{k})$ — операторы рождения и уничтожения электронов и примесонов соответственно; $V_0(\mathbf{q})$ — затравочная вершина электрон-примесонного взаимодействия. Суммирование по \mathbf{k} , \mathbf{k}' происходит по зоне Бриллюэна.

Как показано в работе [6], электрон-примесонное взаимодействие приводит к существенным инфракрасным перенормировкам $V_0(\mathbf{q})$ и функции Грина примесонов $\Psi_0(\mathbf{k}, \epsilon_n)$

$$\Psi_0(\mathbf{k}, \epsilon_n) = [i\epsilon_n - \omega(\mathbf{k}) + \zeta]^{-1}, \quad (2)$$

где ϵ_n — мацубаровская частота, ζ — химический потенциал примесонов. Вычисление перенормировок в паркетном приближении [7] приводит к следующему результату:

$$V(\mathbf{q}) = V_0(\mathbf{q}) (D/\max(T, \epsilon_0))^2, \quad (3)$$

$$\Psi(\mathbf{k}, \epsilon_n) = [i\epsilon_n - \bar{\omega}(\mathbf{k}) + \zeta]^{-1} (\max(T, \epsilon_0)/D)^2, \quad (4)$$

D — ширина зоны электронов проводимости; $\tilde{\omega}(\mathbf{k})$ — перенормированный закон дисперсии примесонов; безразмерная константа электрон-примесонного взаимодействия

$$g = 2 \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \frac{|V_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)|^2}{|\nabla\epsilon(\mathbf{k}_1)| |\nabla\epsilon(\mathbf{k}_2)|}. \quad (5)$$

Интегрирование происходит по поверхности Ферми.

Первые члены ряда теории возмущений для $\Psi(\mathbf{k}, \epsilon_n)$ и $V(\mathbf{q})$ приведены на рис. 1, 2 соответственно. Штриховая линия соответствует функции Грина примесонов, сплошная — функции Грина электронов, а волнистая линия — затравочному электрон-примесонному взаимодействию $V_0(\mathbf{q})$. По порядку величины $g \sim [N(0)V_0]^2$, где $N(0)$ — плотность электронных состояний на поверхности Ферми (ПФ). Область применимости паркетного приближения определяется неравенством [8]

$$N^3(0)V_0^2 \ln(D/\max(T, \epsilon_0)) \ll 1. \quad (6)$$

Таким образом, в области применимости теории $g \ll 1$. При $g \rightarrow 0$ все перенормировки исчезают. Рассеяние электронов примесонами было рассмотрено в работе [8]. Вклад примесонов в собственно-энергетическую часть электронной функции Грина в области малых концентраций примесонов $x \ll 1$ дается графиком (рис. 3).

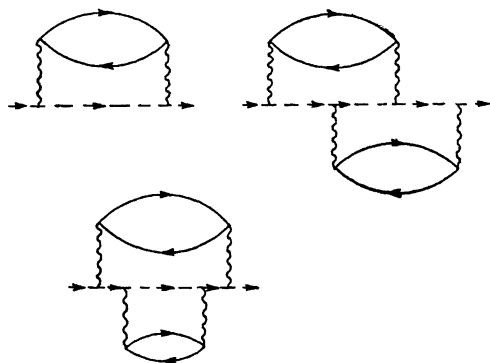


Рис. 1. Графики для примесонной функции Грина.

Двойная штриховая линия соответствует $\Psi(\mathbf{k}, \epsilon_n)$, а заштрихованный треугольник с волнистой линией — $V(\mathbf{q})$.

При $T \gg \epsilon_0$, согласно [8], время релаксации электрона на примесонах $\tau_{e, \text{imp}}$ равно

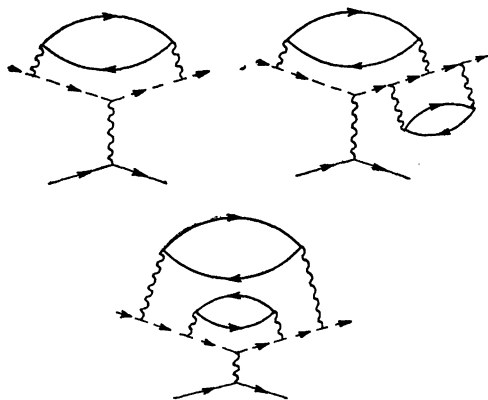


Рис. 2. Графики для вершины электрон-примесонного взаимодействия.

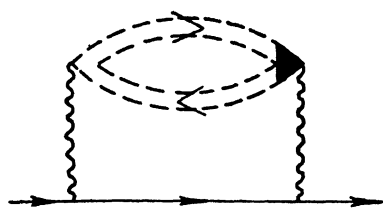


Рис. 3. График для электронной функции Грина.

$$\tau_{e, \text{imp}}^{-1} = \frac{xN(0)V_0^2}{\hbar} \left(\frac{T}{D}\right)^g \sim \frac{xgT^g \epsilon_F^{1-g}}{\hbar}. \quad (7)$$

Такая зависимость $\tau_{e, \text{imp}}(T)$ приводит к тому, что в широком интервале температур имеет место нетривиальная зависимость сопротивления $\rho \sim T^g$ [8].

Поскольку в формулу (7) не входит величина ϵ_0 , характеризующая квантовые свойства дефектов, то очевидно, что эта зависимость должна наблюдаться и для системы тяжелых термализованных дефектов, т. е. зависимость (7) не переходит в таковую, полученную в рамках техники [5] при $\epsilon_0 \rightarrow 0$. Как отмечалось выше, дело в том, что мы считаем кванто-

вые дефекты внутренними степенями свободы кристалла, а не «замороженным» внешним полем.

От величины ϵ_0 существенно зависит время релаксации системы дефектов t_0 . С ростом массы дефекта ϵ_0 экспоненциально убывает, а t_0 экспоненциально растет. Таким образом, для наблюдения нетривиальной температурной зависимости в системе с тяжелыми дефектами необходимо производить измерение спустя время $t \gg t_0$ после изменения T , что требует очень большого времени эксперимента. При обычных скоростях измерений система тяжелых дефектов не успевает релаксировать и ее можно считать «замороженной».

Учет взаимодействия между примесонами приводит к их кластеризации при понижении температуры и кардинальной перестройке примесной подсистемы [9].

Данная работа посвящена исследованию теплопроводности металлов, содержащих подвижные дефекты, в области температур $T < \Theta$ (Θ — температура Дебая), включающей в себя и температуру кластеризации T_0 . Теплопроводность квантовых дефектов в диэлектрике рассмотрена ранее Пушкаровым [10].

В теплопроводность кристалла вносят вклад электронная, фононная и примесонная подсистемы, взаимодействующие между собой. Рассмотрим каждую из них в отдельности.

1. Электроны

Характерные обратные времена релаксации электронов вследствие рассеяния на фононах и электронах равны соответственно [11]

$$\tau_{e, \text{ph}}^{-1} \sim T^3 / \Theta^2 \hbar, \quad \tau_{e, e}^{-1} \sim T^2 N(0) \sim T^2 / \hbar \epsilon_F. \quad (8)$$

Сравнивая (8) с выражением (7) для $\tau_{e, \text{imp}}^{-1}$, получаем, что в области концентраций

$$x \gg (T / \epsilon_F)^{2-g}, \quad (T / \Theta)^2 (T / \epsilon_F)^{1-g} \quad (9)$$

основным механизмом рассеяния электронов является их взаимодействие с примесонами.

2. Фононы

В металлах при $T < \Theta$ обратное время релаксации фононов вследствие взаимодействия с электронами намного превосходит частоту фонон-фононных столкновений [11] и равно $\tau_{\text{ph}, e}^{-1} = (T / \hbar) \sqrt{m / M}$, где m , M — массы электрона и иона. Характерное обратное время рассеяния тепловых фононов на статических дефектах равно (см., например, [11])

$$\tau_{\text{ph}, \text{imp st}}^{-1} = x T^4 / \Theta^3 \hbar. \quad (10)$$

Электрон-примесонное взаимодействие перенормирует вершину примесон-фононного взаимодействия аналогично (3), где под V_0 и V следует теперь понимать затравочную и полную вершины примесон-фононного взаимодействия. В результате аналогично $\tau_{e, \text{imp}}$ получаем для $\tau_{\text{ph}, \text{imp}}$

$$\tau_{\text{ph}, \text{imp}}^{-1} = \tau_{\text{ph}, \text{imp st}}^{-1} (T / D)^g = x (T^4 / \Theta^3 \hbar) (T / D)^g. \quad (11)$$

В области $T \ll \Theta$ $\tau_{\text{ph}, \text{imp}}^{-1} \ll \tau_{\text{ph}, e}^{-1}$.

3. Примесоны

Взаимодействие примесонов друг с другом мы обсудим несколько позже. Для невзаимодействующих примесонов основным механизмом релаксации в нормальном металле при $T \ll \Theta$ является их рассеяние на электронах [12]

$$\tau_{\text{imp}, e}^{-1} = g T / \hbar. \quad (12)$$

Учет ИК перенормировок не изменяет данный результат. Выражение (12) получено для случая зонного движения примесонов, когда $\tau_{\text{imp}}\bar{\varepsilon}_0 \gg 1$ ($\bar{\varepsilon}_0$ — ширина примесонной зоны с учетом ИК расходимостей [6]). Однако и в случае нарушения данного неравенства использование выражения (12) приведет только к завышению примесонного вклада в теплопроводность.

В области температур $T \ll \bar{\varepsilon}_0$ имеем, согласно [13],

$$\tau_{\text{imp}, e}^{-1} = gT^2/\hbar\bar{\varepsilon}_0. \quad (13)$$

4. Теплопроводность

Теперь, зная основные механизмы рассеяния для каждой из подсистем, оценим их вклад в теплопроводность. Следует заметить, что вследствие рассеяния (с перебросом квазиимпульса) на примесонах с характерным импульсом k_{imp} , который при $T > \bar{\varepsilon}_0$ порядка бриллюэновского импульса k_B , не возникает принципиальной разницы в температурной зависимости кинетических коэффициентов металлов с открытыми и закрытыми ПФ. Такая разница может проявиться при $T \ll \bar{\varepsilon}_0$, когда $k_{\text{imp}} \ll k_B$. В этом случае проводимость и теплопроводность металлов с закрытой ПФ пропорциональны $\exp(\bar{\varepsilon}_0/T)$.

Поскольку изменение энергии электрона при рассеянии на примесоне не превосходит $\bar{\varepsilon}_0$, то при $T \gg \bar{\varepsilon}_0$ оно является практически упругим. В этой области температур выполняется закон Видемана—Франца [11] и электронный вклад в коэффициент теплопроводности равен

$$\alpha_e = \frac{\pi^2 T}{3e^2} \sigma = \frac{\pi^2 T}{3e^2} \sigma_0 \left(\frac{D}{T}\right)^g, \quad (14)$$

где σ_0 — проводимость в кристалле с «замороженными» дефектами той же химической природы. По порядку величины

$$\alpha_e = (T/xgd\hbar)(D/T)^g \sim T^{1-g}, \quad (15)$$

d — межатомное расстояние. При $T \ll \bar{\varepsilon}_0$ закон Видемана—Франца нарушается, так как рассеяние электронов на примесонах становится неупругим и транспортное время рассеяния [8]

$$(\tau_{e, \text{imp}})_{\text{tr}} = (\hbar/xg\varepsilon_F)(\bar{\varepsilon}_0/T)^2 (D/\varepsilon_0)^g \quad (16)$$

существенно отличается от времени энергетической релаксации

$$\tau_{e, \text{imp}} = (\hbar/xg\varepsilon_F)(\bar{\varepsilon}_0/T)(D/\varepsilon_0)^g. \quad (17)$$

Поэтому при $T \ll \bar{\varepsilon}_0$

$$\alpha_e = (\varepsilon_0/xgd\hbar)(D/\varepsilon_0)^g = \text{const}. \quad (18)$$

Однако, как будет показано ниже, при $T \ll \varepsilon_0$ принципиальную роль играет взаимодействие примесонов друг с другом. Поэтому наблюдение зависимости (18) в равновесном образце не представляется возможным.

Фоновый вклад в коэффициент теплопроводности по порядку величины равен

$$\alpha_{\text{ph}} = \frac{1}{d^3} \frac{s^2 T^2 \hbar}{\Theta^3} \sqrt{\frac{M}{m}} \sim \frac{T^2 \varepsilon_F}{\hbar d \Theta^2}, \quad (19)$$

где s — скорость звука. Отношение

$$\alpha_{\text{ph}}/\alpha_e = xg(T^{1+g}\varepsilon_F^{1-g}/\Theta^2). \quad (20)$$

Легко видеть, что при $x \sim 10^{-3} \div 10^{-2}$ и $T \ll \Theta$ электронный вклад в теплопроводность преобладает.

Примесонная теплоемкость C_{imp} была найдена в [10]

$$C_{\text{imp}} = \begin{cases} x d^{-3}, & T^* \ll T \ll \bar{\varepsilon}_0, \\ x d^{-3} \varepsilon_0^2 / T^2, & T \gg \bar{\varepsilon}_0, \end{cases} \quad (21)$$

T^* — температура вырождения примесонного газа. Учет ИК перенормировки ε_0 , т. е. учет зависимости $\tilde{\varepsilon}_0$ от T [6], не изменяет оценки (21). Примесонный вклад в коэффициент теплопроводности при $T \gg \varepsilon_0$ имеет вид

$$\kappa_{\text{imp}} = x (\tilde{\varepsilon}_0 / g \hbar d) (\tilde{\varepsilon}_0 / T)^2, \quad (22)$$

так как скорость примесонов $v = \tilde{\varepsilon}_0 d / \hbar$. Поскольку, согласно [6],

$$\tilde{\varepsilon}_0(T) = \varepsilon_0 (\max(T, \varepsilon_0) / D)^\alpha, \quad (23)$$

где $\alpha \sim g$, то

$$\kappa_{\text{imp}} \propto T^{4\alpha-3} \quad (\alpha \leq 1).$$

Для отношения $\kappa_{\text{imp}} / \kappa_e$ получаем

$$\kappa_{\text{imp}} / \kappa_e = x^2 (\tilde{\varepsilon}_0 / T)^4 (T / D)^\alpha \ll 1. \quad (24)$$

В области $T \leq \varepsilon_0$

$$\kappa_{\text{imp}} = x \tilde{\varepsilon}_0^2 / g \hbar d T, \quad (25)$$

$$\kappa_{\text{imp}} / \kappa_e = x^2 (\tilde{\varepsilon}_0 / T) (\varepsilon_0 / D)^\alpha. \quad (26)$$

В реально достижимой области температур $\kappa_{\text{imp}} \ll \kappa_e$. Видно, таким образом, что в области $T \ll \Theta$ перенос тепла производится электронами, а основным механизмом теплосопrotivления является их рассеяние на примесонах. При $T \geq \Theta$ основным механизмом релаксации электронов является их рассеяние на фононах, а примесонная подсистема не играет существенной роли.

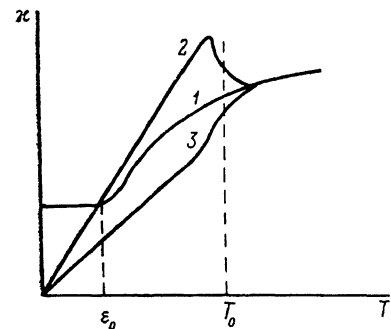


Рис. 4. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности металла с термализованными дефектами в отсутствие (1) и при наличии (2, 3) кластеризации.

5. Кластеризация примесонов

До сих пор мы не учитывали взаимодействия примесонов друг с другом. Однако, как показано в [9], вследствие наличия у примесонов связанных состояний происходит их кластеризация при характерной температуре

$$T_0 = W_0 / |\ln x|, \quad (27)$$

где W_0 — удельная энергия связи примесонов в кластере ($W_0 \sim 10^2 \div 10^3$ К). Доля свободных (некластеризовавшихся) примесонов z ведет себя следующим образом [9]:

$$z = [1 + \gamma x (T / W_0)^2 \exp(W_0 / T)]^{-1}, \quad \gamma \sim 1. \quad (28)$$

В результате кластеризации может возникнуть расслоение на фазы с высокой β и низкой α концентрацией примесонов, а также могут образоваться кластеры с конечным числом частиц [9].

В последнем случае, поскольку подвижность кластеров намного меньше, чем у отдельных примесонов, можно считать замороженной ту часть дефектов, которая кластеризовалась. Тогда для $\tau_{e, \text{imp}}$ имеет место следующее соотношение:

$$\tau_{e, \text{imp}}^{-1} = z \tau_{e, \text{imp}}^{-1} + (1 - z) \tau_{e, \text{cl}}^{-1}, \quad (29)$$

где время $\tau_{e, \text{imp}}$ соответствует рассеянию на невзаимодействующих примесонах, а $\tau_{e, \text{cl}}$ — рассеянию на замороженных кластерах в случае, когда $z=0$.

Из (28), (29) следует, что при $T \ll T_0$ τ_e и электропроводность выходят на постоянное значение, а

$$\kappa_e = T \varepsilon_F \tau_{e, cl} / d h^2 \propto T. \quad (30)$$

В зависимости от вида кластеров при T_0 может происходить как нарастание, так и падение κ (рис. 4). Если же при T_0 реализуется расслоение на фазы, то двухфазное состояние может иметь вид мелких зародышей β -фазы в α -фазе. В этом случае формула (29) применима до тех пор, пока $\tau_{e, imp}^{-1}$ не станет меньше, чем $\tau_{e, ph}^{-1}$ или $\tau_{e, e}^{-1}$.

Авторы благодарны В. Г. Морозову за ценные обсуждения.

Список литературы

- [1] Андреев А. Ф., Лифшиц И. М. // ЖЭТФ. 1969. Т. 56. № 6. С. 2057—2068.
- [2] Fukai Y., Sugimoto H. // Adv. Phys. 1985. V. 34. N 2. P. 263—326.
- [3] Neumaier K., Steinbinder D., Wipf H., Blank H., Kearley G. // Z. Phys. B. 1989. V. 76. N 4. P. 359—363.
- [4] Morr W., Müller A., Weiss G., Wipf H., Golding B. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. N 19. P. 2084—2087.
- [5] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., 1962. 444 с.
- [6] Kondo J. // Physica B. 1984. V. 123. N 2. P. 175—182.
- [7] Nozieres P., Gavoret J., Roulet B. // Phys. Rev. 1969. V. 178. N 3. P. 1084—1096.
- [8] Морозов А. И., Сигов А. С. // ФНТ. 1987. Т. 13. № 6. С. 606—611.
- [9] Морозов А. И., Сигов А. С. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 1. С. 170—177.
- [10] Pushkarov D. I. // Phys. St. Sol. (b). 1977. V. 80. N 1. P. 295—300.
- [11] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М., 1979. 528 с.
- [12] Морозов А. И. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 4. С. 1471—1478.
- [13] Morosov A. I., Sigov A. S. // Sol. St. Comm. 1985. V. 53. N 1. P. 31—34.

Московский институт
радиотехники, электроники и автоматики

Поступило в Редакцию
16 января 1990 г.
В окончательной редакции
22 марта 1990 г.