19

Выделение джоулева тепла при прохождении тока по нанопроволоке

© С.В. Ганцевич, В.Л. Гуревич

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei.Elur@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 29 января 2016 г.)

Рассматривается выделение джоулева тепла при прохождении тока по тонкой проволоке, соединяющей два массивных электрода (два контакта). Необратимое тепловыделение, симметричное в отсутствие электрон-фононного взаимодействия, при учете этого взаимодействия получается несимметричным: джоулево тепловыделение оказывается больше в том из симметричных контактов, который лежит в направлении дрейфовой скорости носителей тока.

В последние годы опубликован ряд работ, в которых рассматривалось выделение тепла при прохождении тока по тонкой проволоке (см. работу [1] и ссылки в ней). В отсутствие электрон-фононного взаимодействия выделение джоулева тепла в обоих контактах, к которым примыкает проволока, может оказаться симметричным; такая ситуация подробно обсуждается, например, в [2]. Однако ситуация может измениться радикальным образом при учете электрон-фононного взаимодействия в проволоке. Цель настоящей работы — проследить на простейшем примере, как учет электрон-фононного взаимодействия приводит к нарушению симметрии, и определить характер несимметричного необратимого тепловыделения.

Рассмотрим систему, состоящую из полупроводниковой монокристаллической проволоки, соединяющей два массивных контакта, к которым приложена разность потенциалов. Проволокой для краткости будем называть проводник, у которого продольный размер L заметно превышает поперечные размеры. Будем считать, что ориентация проволоки совпадает с одной из осей симметрии кристалла. Рассматриваем случай достаточно высоких температур T, так что длина свободного пробега электронов проводимости l гораздо меньше длины проволоки L. Взаимодействие колебаний решетки с электронами будем описывать методом деформационного потенциала Λ, т. е. считаем рассматриваемый кристалл не пьезоэлектрическим (для пьезоэлектриков наша теория нуждалась бы в непринципиальной модификации). Величину Λ для полупроводника, где концентрация электронов невелика, можно считать константой (в металлах, вообще говоря, следовало бы учитывать ее зависимость от квазиимпульса электрона).

Плотность упругой энергии с учетом взаимодействия упругих колебаний с электронами проводимости запишем в виде

$$U = \frac{1}{2}\lambda u_{xx}^2 + \Lambda n u_{xx}. \tag{1}$$

Здесь ось x совпадает с направлением проволоки, u_{xx} — соответствующая компонента тензора деформации, Λ — константа деформационного потенциала, описывающего взаимодействие электронов с деформацией, $n = n_0 + n'$ — концентрация электронов проводимости, n' — ее осциллирующая часть, возникающая из-за возмущающего действия звуковой волны, в которой деформация изменяется по закону

$$u_{xx} \propto \exp i(qx - \omega t), \tag{2}$$

где ω — частота, а $q \equiv q_x$ — компонента волнового вектора звука вдоль оси x. Здесь мы предполагаем, что рассматривается продольный звук; поперечный звук можно рассмотреть таким же образом.

При прохождении звука по проволоке возникает переменный ток, плотность которого j равна

$$j = \frac{1}{e}\sigma\Lambda\frac{\partial u_{xx}}{\partial x} - eD\frac{\partial n}{\partial x} - \sigma\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \tag{3}$$

где σ — проводимость, D — коэффициент диффузии, φ — электрический потенциал. Принимая во внимание уравнение неразрывности

$$e\frac{\partial n'}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \tag{4}$$

и уравнение Пуассона

$$\varepsilon\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = -4\pi e n', \tag{5}$$

получаем

$$j = -\frac{1}{e}\frac{iq\sigma\omega\Lambda u_{xx}}{\omega + i(q^2D + 4\pi\sigma/\varepsilon)}$$

$$= \frac{1}{e}\frac{q^2\sigma\omega\Lambda u}{\omega + i(q^2D + 4\pi\sigma/\varepsilon)}, \tag{6}$$

$$n' = \frac{1}{e^2}\frac{q^3\sigma\Lambda u}{\omega + i(q^2D + 4\pi\sigma/\varepsilon)}. \tag{7}$$

Здесь u — смещение, так что $u_{xx} = \partial u/\partial x$.

Благодаря взаимодействию между деформацией и электронами проводимости происходит поглощение звука. Чтобы определить его, воспользуемся уравнением для распространения звука

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial U}{\partial u_{xx}} = 0, \tag{8}$$

где ρ — массовая плотность материала нанопроволоки. Для закона затухания интенсивности звука $I(x)$ как функции координаты x получаем

$$I(x) = I_0 \exp(-\Gamma x), \tag{9}$$

где

$$\Gamma \equiv s^{-1}\gamma = \frac{\sigma\Lambda^2 q^3}{e^2\rho s^2}\frac{\omega}{\omega^2 + (q^2 D + 4\pi\sigma/\varepsilon)^2}. \tag{10}$$

Здесь $s = \sqrt{\lambda/\rho}$ — скорость звука. Обратим внимание на то, что $\sigma \propto e^2$, так что отношение σ/e^2 от e не зависит, как и должно быть.

Мы считаем, что коэффициент поглощения Γ есть малая величина, а именно

$$\Gamma/q \ll 1. \tag{11}$$

Тогда с этой же точностью нужно считать, что в выражении для Γ величины ω и q связаны соотношением

$$\omega = sq. \tag{12}$$

Перейдем теперь к рассмотрению токового состояния проволоки, такого, что под действием приложенной разности потенциалов возникает постоянный ток, имеющий плотность $\mathbf{J}$. Под влиянием возмущающего действия звуковой волны возникает переменная добавка к плотности тока, равная

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial n} n' \equiv e\mathbf{V}n', \tag{13}$$

где дрейфовая скорость

$$\mathbf{V} = \frac{1}{e}\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial n}. \tag{14}$$

Выкладки, аналогичные описанным выше, дают следующее выражение для коэффициента поглощения звука Γ:

$$\Gamma \equiv s^{-1}\gamma = \frac{\sigma\Lambda^2 q^3}{e^2\rho s^2}\frac{\omega - \mathbf{qV}}{(\omega - \mathbf{qV})^2 + (q^2 D + 4\pi\sigma/\varepsilon)^2} + \Gamma_p, \tag{15}$$

что можно коротко записать как

$$\Gamma = \Gamma_0 \frac{\omega - \mathbf{qV}}{\omega} + \Gamma_p, \quad \text{или} \quad \gamma = \gamma_0 \frac{\omega - \mathbf{qV}}{\omega} + \gamma_p, \tag{16}$$

где

$$\gamma_0 = \Gamma_0 s = \frac{\sigma\Lambda^2 q^3}{e^2\rho s}\frac{\omega}{(\omega - \mathbf{qV})^2 + (q^2 D + 4\pi\sigma/\varepsilon)^2}. \tag{17}$$

Здесь $\Gamma_p = s^{-1}\gamma_p$ описывает решеточный вклад в поглощение за счет фононного ангармонизма (который мы до сих пор не учитывали). Он выражается через коэффициент вязкости η

$$\Gamma_p \equiv s^{-1}\gamma_p = \frac{\eta\omega^2}{\rho s^2} \tag{18}$$

(см. [3,4]). Здесь η — краткая запись для η_{xxxx} (соответствующей компоненты тензора коэффициентов вязкости или внутреннего трения). Решеточный вклад может преобладать в пределе малых или же, наоборот, очень больших фононных частот. Далее нас будут интересовать промежуточные частоты, и мы, чтобы не загромождать обозначения, не будем учитывать этот вклад.

При $\mathbf{qV} > \omega$, т. е. при

$$V > s, \tag{19}$$

выражение (15) может изменить знак. Перемена знака означает усиление звуковых волн. Фактически речь может идти о нарастании интенсивности звуковых флуктуаций с данной частотой и волновым вектором, которые удовлетворяют условиям

$$\omega_{\mathbf{q}}\tau \ll 1, \qquad ql \ll 1, \tag{20}$$

где τ и l — время и длина свободного пробега электронов проводимости соответственно.

Мерой интенсивности флуктуаций может служить величина $N_{\mathbf{q}}$, имеющая наглядный физический смысл: это функция распределения фононов данной колебательной ветви с волновым вектором $\mathbf{q}$. Как показано в работах [5,6], при выполнении условий (20) она удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{\partial N_{\mathbf{q}}}{\partial t} + \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{q}}\frac{\partial N_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{r}} + \gamma_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} = \left[\frac{\partial N_{\mathbf{q}}}{\partial t}\right]_g. \tag{21}$$

Левая часть уравнения имеет стандартный вид и описывает эволюцию флуктуаций и их затухание или усиление (в зависимости от знака γ). Правая часть описывает независимый процесс — генерацию новых флуктуаций. Повторяя рассуждения, приведенные в [5,6], при выполнении условий (20) можем представить правую часть (21) виде

$$\left[\frac{\partial N_{\mathbf{q}}}{\partial t}\right]_g = \gamma_0 N_0, \tag{22}$$

где

$$N_0 = \frac{T}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}.$$

Здесь T — температура (в энергетических единицах), N_0 — предельное классическое равновесное значение для функции распределения фононов, справедливое при $\hbar\omega \ll T$. При учете решеточного вклада в поглощение следует учесть также и решеточный вклад в величину γ_0, т. е. произвести замену:

$$\gamma_0 \Rightarrow \gamma_0 + \gamma_p. \tag{23}$$

Рассмотрим решение уравнения (21) для флуктуаций $N^{(+)}(x)$, распространяющихся в положительном направлении x в стационарном случае, когда

$$\frac{\partial N^{(+)}(x)}{\partial t} = 0 \tag{24}$$

и уравнение (21) приобретает вид

$$s\,\frac{\partial N^{(+)}(x)}{\partial x} + \gamma^{(+)} N^{(+)}(x) = \gamma_0^{(+)} N_0. \tag{25}$$

Здесь (в пренебрежении решеточным вкладом γ_p)

$$\gamma^{(+)} = \frac{\sigma\Lambda^2 q^2}{e^2\rho s^2}\,\frac{\omega_{\mathbf{q}}(\omega_{\mathbf{q}} - \mathbf{qV})}{(\omega - \mathbf{qV})^2 + (q^2 D + 4\pi\sigma/\varepsilon)^2},$$

$$\gamma_0^{(+)} = \frac{\sigma\Lambda^2 q^2}{e^2\rho s^2}\,\frac{\omega_{\mathbf{q}}^2}{(\omega - \mathbf{qV})^2 + (q^2 D + 4\pi\sigma/\varepsilon)^2}. \tag{26}$$

В качестве граничного условия зададим значение функции $N^{(+)}(x)$ при $x = 0$:

$$N^{(+)}(x)\Big|_{x=0} = N_1^{(+)}. \tag{27}$$

Решение уравнения (21) при граничном условии (27) есть

$$N^{(+)}(x) = N_1^{(+)} e^{-\gamma^{(+)}x/s} + N_0\,\frac{\gamma_0^{(+)}}{\gamma^{(+)}}\left[1 - e^{-\gamma^{(+)}x/s}\right]$$

$$= N_1^{(+)} e^{-\Gamma^{(+)}x} + N_0\,\frac{\Gamma_0^{(+)}}{\Gamma^{(+)}}\left(1 - e^{-\Gamma^{(+)}x}\right), \tag{28}$$

где $\Gamma_0^{(+)} = \gamma_0^{(+)}/s$. Если размер структуры L заметно превышает длину поглощения $1/\Gamma^{(+)}$, т.е.

$$L\Gamma^{(+)} \gg 1,$$

то при $\Gamma^{(+)} > 0$ имеем

$$N^{(+)}(x) = N_0\,\frac{\Gamma_0^{(+)}}{\Gamma^{(+)}}. \tag{29}$$

В пренебрежении решеточным вкладом получаем

$$N^{(+)}(x) = N_0\,\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}} - \mathbf{qV}}. \tag{30}$$

Таким образом, в этом случае интенсивность флуктуаций в большей части образца пространственно однородна (не зависит от x). Если же $\Gamma^{(+)} < 0$, то имеет место пространственное нарастание акустических колебаний в направлении x, так что для положительных значений q уравнение (25) имеет только пространственно неоднородное решение. Сохраняя только экспоненциально нарастающие члены, это решение можно представить в виде

$$N^{(+)}(x) = \left(N_1^{(+)} + N_0\frac{\gamma_0^{(+)}}{|\gamma^{(+)}|}\right) e^{|\gamma^{(+)}|x/s}$$

$$= \left(N_1^{(+)} + N_0\frac{\Gamma_0^{(+)}}{|\Gamma^{(+)}|}\right) e^{|\Gamma^{(+)}|x}. \tag{31}$$

Аналогичным образом можно вычислить интенсивность флуктуаций, распространяющихся вдоль отрицательного направления x. В этом случае в качестве граничного условия следует задать значение величины $N(x)$ при $x = L$. В предельном случае

$$L\Gamma^{(-)} \gg 1,$$

когда в большей части образца эта интенсивность не зависит от x:

$$N^{(-)} = N_0\,\frac{\Gamma_0^{(-)}}{\Gamma^{(-)}}. \tag{32}$$

Определим отношение $N^{(-)}/N^{(+)}$ в простейшем случае, когда решеточным вкладом Γ_p в поглощение можно пренебречь, а разность $\omega - \mathbf{qV}$ находится в следующем интервале:

$$0 < (\omega - \mathbf{qV}) \ll q^2 D + 4\pi\sigma/\varepsilon. \tag{33}$$

Имеем

$$\frac{N^{(-)}}{N^{(+)}} = \frac{s - V}{s + V}. \tag{34}$$

Видно, что уже в этом случае интенсивность неравновесных фононов, распространяющихся в противоположных направлениях, оказывается различной. Убедимся, что связанное с этими фононами тепловыделение в контактах может быть несимметричным, причем оно оказывается больше в том контакте, который лежит в направлении дрейфовой скорости $\mathbf{V}$.

Будем считать, что соединение тонкой проволоки, к которой приложено напряжение, с обоими симметричными контактами происходит достаточно плавно, так что при прохождении фононов из проволоки в контакт отражение фононов и дифракционные эффекты не играют роли (в противном случае следовало бы задать коэффициенты прохождения и отражения фононов в месте соединения провода с контактом). Функция распределения фононов в контакте есть острая функция волнового вектора $\mathbf{q}$. Присвоим номер 1 контакту, который лежит в направлении дрейфовой скорости $\mathbf{V}$, а номер 2 — другому контакту.

Определим фононный вклад в скорость тепловыделения dQ/dt в контакте 1, т.е. тепло, выделяемое в этом контакте в единицу времени. Как известно [4,7], скорость тепловыделения равна

$$\frac{dQ}{dt} = T\,\frac{d\mathcal{S}}{dT}, \tag{35}$$

где T — температура, а $\mathcal{S}$ — энтропия системы фононов в этом контакте [7,8], равная

$$\mathcal{S} = \int d^3r S(\mathbf{r}),$$

$$S(\mathbf{r}) = \int d\eta_{\mathbf{q}}\big[-N_{\mathbf{q}}\ln N_{\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}}\ln(N_{\mathbf{q}} + 1)\big],$$

$$d\eta_{\mathbf{q}} = d^3q/(2\pi)^3. \tag{36}$$

Здесь $S(\mathbf{r})$ — плотность энтропии. Далее воспользуемся уравнением

$$\int\limits_f df s_n^{(1)} = \frac{d}{dt}\int\limits_{\mathcal{V}} d^3r S^{(1)}(\mathbf{r}). \tag{37}$$

Левая часть — это интеграл от нормальной компоненты s_n плотности потока энтропии фононов $\mathbf{s}$, взятый по поверхности f, где кончается собственно нанопроволока (далее плавно переходящая в контакт); df — элемент такой поверхности. Правая часть представляет собой нарастающую энтропию контакта 1; интегрирование производится по всему объему $\mathscr{V}$ контакта. В итоге для тепловыделения получаем

$$\frac{dQ^{(1)}}{dt} = T \int\limits_f df s_n^{(1)}. \tag{38}$$

Фононный вклад в плотность потока $\mathbf{s}$ есть [8]

$$\mathbf{s} = \int d\eta_{\mathbf{q}} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{q}} \left[-N_{\mathbf{q}} \ln N_{\mathbf{q}} + (N_{\mathbf{q}} + 1) \ln(N_{\mathbf{q}} + 1) \right]. \tag{39}$$

Представим функцию $N_{\mathbf{q}}$ в виде суммы равновесной величины N_0 из формулы (22) и малой неравновесной добавки $\Delta N_{\mathbf{q}}^{(1)}$, такой, что $|\Delta N_{\mathbf{q}}^{(1)}| \ll N_0$:

$$N = N_0 + \Delta N_{\mathbf{q}}^{(1)}, \tag{40}$$

где

$$\Delta N_{\mathbf{q}}^{(1)} = N_0 \frac{\mathbf{qV}}{\omega_{\mathbf{q}} - \mathbf{qV}}.$$

Здесь верхний индекс указывает номер контакта (в данном случае 1). Тогда выражение (38) приобретает вид

$$T \frac{dQ^{(1)}}{dt} = \int\limits_f df \int d\eta_{\mathbf{q}} \Delta N_{\mathbf{q}}^{(1)} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(\frac{\partial \omega_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{q}} \right)_n. \tag{41}$$

Окончательно выражение (41) можно записать в следующем виде

$$\begin{aligned} T \frac{dQ^{(1)}}{dt} &= f \int d\eta_{\mathbf{q}} \Delta N_{\mathbf{q}}^{(1)} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(\frac{\partial \omega_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{q}} \right)_n \\ &= \frac{1}{2} f \int d\eta_{\mathbf{q}} N_0 \frac{\mathbf{qV} \omega_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}^2 - (\mathbf{qV})^2} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(\frac{\partial \omega_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{q}} \right)_n, \end{aligned} \tag{42}$$

где f — площадь поперечного сечения проволоки. При переходе к последнему равенству мы приняли во внимание, что $\omega_{\mathbf{q}}$ — четная, а $\partial \omega_{\mathbf{q}} / \partial \mathbf{q}$ — нечетная функция $\mathbf{q}$. Выражение в правой части имеет ясный физический смысл потока энергии через поверхность f, переносимого неравновесными фононами; в контакте он диссипирует в тепло. Считаем, что размеры контакта превышают длину свободного пробега фононов, т. е. ту длину, на которой происходит диссипация. Таким образом, формула (42) описывает фононный вклад в необратимое (джоулево) выделение тепла. Во избежание недоразумений отметим следующее обстоятельство. В эту формулу не нужно включать ту часть потока, которая переносится равновесными фононами, поскольку она компенсируется равновесными фононами, распространяющимися в противоположном направлении.

Выражение (42) в силу неравенства (33) существенно положительно, как и должно быть для джоулева тепла. Отметим, что наряду с джоулевым тепловыделением должно иметь место также и обратимое выделение тепла — так называемый эффект Пельтье, знак которого изменяется с изменением направления постоянного тока на противоположное. Этот эффект здесь не рассматривается.

Аналогичное выражение для контакта 2 получается заменой $\mathbf{q} \to -\mathbf{q}$:

$$T \frac{dQ^{(2)}}{dt} = \int\limits_f df \int d\eta_{\mathbf{q}} \Delta N_{\mathbf{q}}^{(2)} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(\frac{\partial \omega_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{q}} \right)_n, \tag{43}$$

где

$$\Delta N_{\mathbf{q}}^{(2)} = -N_0 \frac{\mathbf{qV}}{\omega_{\mathbf{q}} + \mathbf{qV}}.$$

Таким образом, уже в том случае, когда фононы, распространяющиеся в прямом направлении (т. е. в направлении дрейфовой скорости $\mathbf{V}$), затухают, фононный вклад в тепловыделение в контакте 1 превышает вклад в контакте 2. Тем более это утверждение справедливо для ситуации, когда амплитуды фононов, распространяющихся в прямом направлении, экспоненциально нарастают согласно формуле (31), т. е. имеет место усиление акустических колебаний.

Подведем итоги. В работе рассмотрен случай одномерного полупроводника (проволоки), который соединяется с двумя плавно расширяющимися контактами; к контактам приложена постоянная разность потенциалов. В этих условиях электронная и фононная системы неравновесны. Вычисляется вклад фононов в необратимое тепловыделение в контактах (т. е. выделение джоулева тепла) в предположении, что из-за интенсивного рассеяния происходит эффективная релаксация фононов в контакте. При этом необратимое тепловыделение в контактах оказывается разным, причем оно больше в том из контактов, который лежит в направлении дрейфовой скорости элекронов $\mathbf{V}$.

Список литературы

[1] J.-T. Lü, R.B. Christensen, J.-S.. Wang, P. Hedegård, M. Brandbyge. Phys. Rev. Lett. **114**, 096 801 (2015).
[2] V.L. Gurevich. Phys. Rev. B **55**, 4522 (1997).
[3] V.L. Gurevich. Transport in Phonon Systems. North-Holland (1986). 409 p.
[4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 248 с.
[5] В.Л. Гуревич. ЖЭТФ **46**, 354 (1964).
[6] В.Л. Гуревич. ЖЭТФ **47**, 1291 (1964).
[7] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Физматлит, М. (2001). 616 с.
[8] В.Л. Гуревич, М.И. Мурадов. ФТТ **54**, 625 (2012).