

ВОЛЬТ-АМПЕРНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МЕТАЛЛА ПРИ НУЛЕВОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ В СЛУЧАЕ, КОГДА ЕДИНСТВЕННЫМ КАНАЛОМ РАССЕЯНИЯ ЯВЛЯЕТСЯ ИСПУСКАНИЕ ФОНОНОВ

П.Г.Акишин, И.В.Амирханов, Л.А.Максимов,
Д.В.Павлов, И.В.Пузынин

Математическая модель, описывающая металл при нулевой температуре в случае, когда единственным каналом рассеяния является испускание фононов, сводится к нелинейному интегро-дифференциальному уравнению со сдвинутым аргументом. Дискретизация проведена на основе метода сплайн-аппроксимации. Возникающее нелинейное дискретизованное уравнение решается методом простой итерации. Результаты численного моделирования согласуются с экспериментальными.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

The Voltage-Current Dependence of Metal when Temperature is Zero and Single Channel of Scattering is Phonon Emittance

P.G.Akishin et al.

A mathematical model describing voltage-current dependence of metal when temperature is zero and single channel of scattering is phonon emittance is suggested. It is reduced to solution of nonlinear integro-differential equation with argument shift. A discretization is realized by spline approximation. A discrete nonlinear equation is solved by simple iteration method. Numerical results are in good agreement with the measurement data.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

1. Введение

В 1982 г. Ю.Богод и др. [1] экспериментально показали, что электропроводность висмута при гелиевой температуре ($T = 4.2$ К) имеет ярко выраженный нелинейный характер (рис.1).

Так же, как и в аналогичном эффекте Есаки (которому посвящен обзор [2]), эта нелинейность обусловлена тем, что при низких температурах единственным возможным каналом рассеяния электронов является генерация колебаний решетки — фононов.

Этот эффект имеет важное научное и прикладное значение [2], поэтому представляется необходимым построение количественной теории эффекта, изложению которой посвящена настоящая работа.

2. Вывод кинетического уравнения

С качественной точки зрения вольт-амперная характеристика (рис.1) объясняется следующим образом. Пока электрический ток $j = env_d$ (e — заряд, n — плотность электронов) достаточно мал, средняя скорость направленного движения электронов (дрейфовая скорость v_d) тоже мала по сравнению со скоростью звука и генерация звука (U) запрещена законами сохранения импульса и энергии.

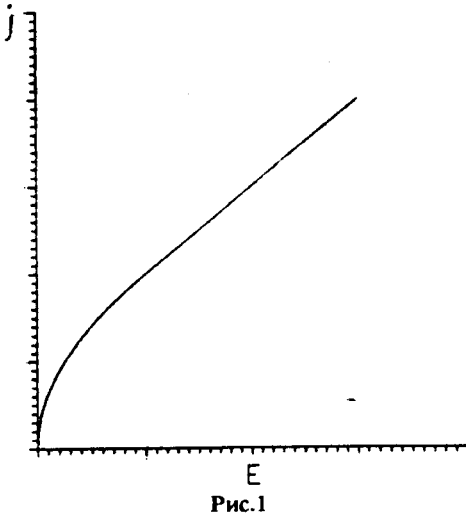


Рис.1

Поэтому в отсутствии примесей, пока $j < j_C = enU$, ток движется без сопротивления, начальный участок вольт-амперной характеристики теоретически должен быть строго вертикальным, а реально в эксперименте [1] (рис.1) имеет крутой наклон из-за остаточного сопротивления. Когда же $j > j_C$, начинается генерация звука (спонтанное испускание фононов) подобно тому, как возникает ударная волна при сверхзвуковом движении самолета. Это приводит к резкому увеличению электросопротивления и наклона вольт-ампер-

ной характеристики, как показано на рис.1. Чтобы количественно объяснить этот эффект, следует решить кинетические уравнения для одночастичной функции распределения электронов. В «интеграле столкновений» этого уравнения должны быть учтены два конкурирующих процесса.

Первый процесс называется «уходом». Это перескок электрона из заполненного состояния с импульсом \vec{p} в любое пустое состояние с импульсом \vec{p}' благодаря испусканию фонона с импульсом $\vec{q} = \vec{p} - \vec{p}'$ ($W(q)$ — вероятность испускания в единицу времени):

$$I_{\text{уход}} = \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} W(q) f(p') [1 - f(p)] \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'} - \hbar\omega_q). \quad (2.1)$$

Второй процесс называется «приходом». Это перескок электрона из любого заполненного состояния \vec{p}' в заданное пустое состояние \vec{p} благодаря испусканию фонона с импульсом $-\vec{q}$:

$$I_{\text{приход}} = \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} W(q) f(p') [1 - f(p)] \delta(\epsilon_{p'} - \epsilon_p - \hbar\omega_q). \quad (2.2)$$

В левой части кинетического уравнения записываются члены, которые описывают изменения числа электронов $f(\vec{p}, \vec{r})$ в данной точке фазового пространства (\vec{p}, \vec{r}) из-за пространственного перемещения электронов $(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} f)$ и из-за ускорения электронов во внешнем электрическом поле $(e \cdot \vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}})$. В задаче определения стационарного распределения электронов в постоянном и однородном внешнем поле остается только второй член, так что кинетическое уравнение имеет вид (принято $E \parallel z$):

$$E \frac{\partial f}{\partial p_z} = -I_{\text{уход}} + I_{\text{приход}}. \quad (2.3)$$

Для количественного решения этого уравнения необходимо конкретизировать спектры электронов и фононов, а также зависимость вероятности столкновений от переданного импульса q . Мы примем в данной работе изотропную модель металла со звуковым спектром:

$$\epsilon_p = p^2/2m, \quad \hbar\omega_q = Uq, \quad W = (q/2p_F) W_0, \quad \epsilon_F = p_F^2/2m \gg Up_F. \quad (2.4)$$

Учтем, что электроны в металле есть вырожденный ферми-газ. В сферической системе координат ($p_z = p \cos \theta$)

$$\frac{\partial f}{\partial p_z} = \frac{\partial f}{\partial \epsilon_p} \frac{p}{m} \cos \theta + \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \frac{1}{p} \cong \frac{\partial f}{\partial \epsilon_p} v_F \cos \theta. \quad (2.5)$$

Для электронов металла почти везде $f = 1$ или $f = 0$, кроме узкого слоя вблизи поверхности Ферми, где зависимость функции распределения от энергии намного сильнее, чем зависимость от направления. По этой же причине можно написать

$$\frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} = v_F d\epsilon_p d\theta/4\pi, \quad v_F = mp_F/2\pi^2\hbar^3.$$

В результате после интегрирования по энергии $\epsilon_{p'}$ (для удобства опускаем индекс p' , то есть $\epsilon_{p'} \rightarrow \epsilon'$) кинетическое уравнение принимает окончательный вид:

$$-E \cos \theta \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} =$$

$$= \frac{1}{4\pi} \left\{ f(\varepsilon, \cos \theta) \int d\varphi d \cos \theta' q(\cos \theta, \cos \theta', \varphi) [1 - f(\varepsilon - q, \cos \theta')] - \right.$$

$$\left. - [1 - f(\varepsilon, \cos \theta)] \int d\varphi d \cos \theta' q(\cos \theta, \cos \theta', \varphi) f(\varepsilon + q, \cos \theta') \right\}, \quad (2.6)$$

где

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \cos \theta \cos \theta' - \sin \theta \sin \theta' \cos \varphi},$$

а параметр E пропорционален напряженности электрического поля в проводнике.

3. Дискретизация основных уравнений и метод решения

Обозначив $\cos \theta$ через x , перепишем исходное уравнение (2.6) в следующем виде:

$$\frac{\partial f(\varepsilon, x)}{\partial \varepsilon} + S(\varepsilon, x) f(\varepsilon, x) = R(\varepsilon, x), \quad (3.1)$$

где

$$S(\varepsilon, x) = \frac{1}{4\pi x E} \int_{-1}^1 dx' \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi q(x, x', \varphi) [1 - f(\varepsilon - q(x, x', \varphi), x') +$$

$$+ f(\varepsilon + q(x, x', \varphi), x')],$$

$$R(\varepsilon, x) = \frac{1}{4\pi x E} \int_{-1}^1 dx' \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi q(x, x', \varphi) f(\varepsilon + q(x, x', \varphi), x'),$$

$$q(x, x', \varphi) = \sqrt{\frac{1}{2} (1 - xx' - \sqrt{1 - x^2} \sqrt{1 - x'^2} \cos \varphi)}. \quad (3.2)$$

Граничные условия для $f(\varepsilon, x)$ имеют следующий вид:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow -\infty} f(\varepsilon, x) = 1,$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} f(\varepsilon, x) = 0. \quad (3.3)$$

Известно асимптотическое поведение производных $\frac{\partial f(\varepsilon, x)}{\partial \varepsilon}$ на бесконечности:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow -\infty} \frac{\partial f(\varepsilon, x)}{\partial \varepsilon} = 0,$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \frac{\partial f(\varepsilon, x)}{\partial \varepsilon} = 0. \quad (3.4)$$

Для дискретизации уравнений (3.1)–(3.4) выберем область изменения переменной $\varepsilon[-\varepsilon_{\max}; \varepsilon_{\max}]$ и набор узлов $\{\varepsilon_k, k=\overline{1, N}\}$, причем $\varepsilon_1 = -\varepsilon_{\max}$, $\varepsilon_N = \varepsilon_{\max}$. Интегралы по x' в (3.2) заменим квадратурами по конечному набору узлов $\{x_l, l=\overline{1, M}\}$:

$$S(\varepsilon, x) = \sum_{l=1}^M W_l \frac{1}{4\pi x E} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi q(x, x_1', \varphi) \times \\ \times \left[1 - f(\varepsilon - q(x, x_1', \varphi), x_1') + f(\varepsilon + q(x, x_1', \varphi), x_1') \right], \\ R(\varepsilon, x) = \sum_{l=1}^M W_l \frac{1}{4\pi x E} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi q(x, x_1', \varphi) f(\varepsilon + q(x, x_1', \varphi), x_1'). \quad (3.5)$$

Обозначим $f_{kl} = f(\varepsilon_k, x_l)$, $k = \overline{1, N}$, $l = \overline{1, M}$. Для восполнения $f(\varepsilon, x)$ в области изменения переменной ε построим кубический сплайн $\hat{f}(\varepsilon, x)$ в узлах $\{\varepsilon_k\}$. Ввиду того, что кубический сплайн имеет две степени свободы, определим $\hat{f}(\varepsilon, x)$ условиями на производную на концах интервала $[-\varepsilon_{\max}; \varepsilon_{\max}]$:

$$\frac{\partial \hat{f}(\varepsilon, x)}{\partial \varepsilon} = 0 \text{ при } \varepsilon = \varepsilon_1, \\ \frac{\partial \hat{f}(\varepsilon, x)}{\partial \varepsilon} = 0 \text{ при } \varepsilon = \varepsilon_N. \quad (3.6)$$

Заменяя интегрирование по φ в (3.5) квадратурами, определяем значения $S(\varepsilon, x)$, $R(\varepsilon, x)$ в узлах двумерной сетки $\{\varepsilon_k, x_l\}$ по значениям функции $f(\varepsilon, x)$ в этом же наборе узлов, используя введенный ранее кубический сплайн $\hat{f}(\varepsilon, x)$. Тогда из (3.1) получаем

$$\frac{\partial f_{kl}}{\partial \varepsilon} + S_{kl} f_{kl} = R_{kl}, \quad (3.7)$$

где

$$\frac{\partial f_{kl}}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial f(\varepsilon_k, x_l)}{\partial \varepsilon}, \quad S_{kl} = S(\varepsilon_k, x_l), \quad R_{kl} = R(\varepsilon_k, x_l).$$

Для решения уравнения (3.7) относительно f_{kl} используется следующий итерационный процесс. Обозначим значение функции $f(\varepsilon, x)$ в узлах сетки $\{\varepsilon_k, x_l\}$ на i -й итерации через $f_{kl}^{(i)}$. По $f_{kl}^{(i)}$ вычисляются ин-

тегралы $S_{kl}^{(i)}$, $R_{kl}^{(i)}$. Из (3.7) получаем соотношение на производную и функцию для $(i+1)$ -й итерации:

$$\frac{\partial f_{kl}^{(i+1)}}{\partial \varepsilon} + S_{kl}^{(i)} f_{kl}^{(i+1)} = R_{kl}^{(i)}, \quad k = \overline{1, N}, \quad l = \overline{1, M}. \quad (3.8)$$

Соотношение (3.3), аппроксимированное в следующем виде :

$$\begin{aligned} f_{kl} &= 1 \quad \text{при } k = 1, \\ f_{kl} &= 0 \quad \text{при } k = N, \end{aligned}$$

и уравнение (3.8) позволяют однозначно построить кубический сплайн $(i+1)$ -го приближения.

Итерационный процесс заканчивается, когда невязка уравнения (3.7) становится меньше наперед заданного числа δ . В качестве начального приближения для итерационного процесса бралась функция

$$f^{(0)}(\varepsilon, x) = \frac{1}{e^{\varepsilon - \frac{1}{2}x} + 1}.$$

4. Результаты численного моделирования

На рис.2—5 приведены функции, рассчитанные при различных значениях параметра E на равномерной сетке по переменной ε .

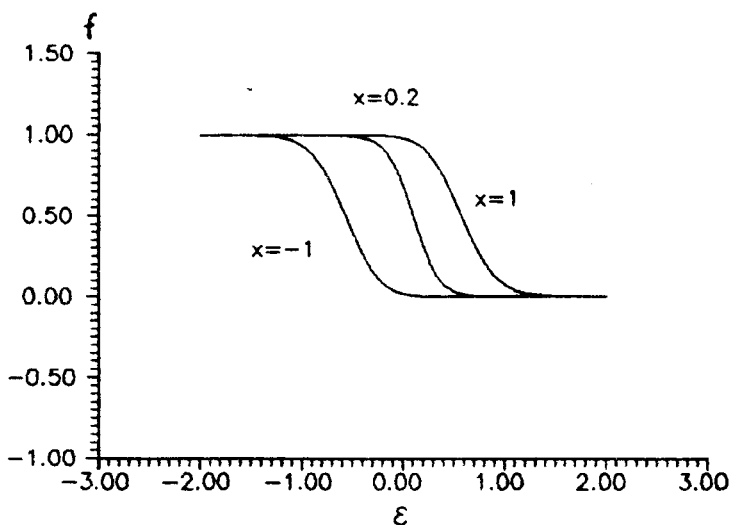


Рис.2. $E = 0,1$

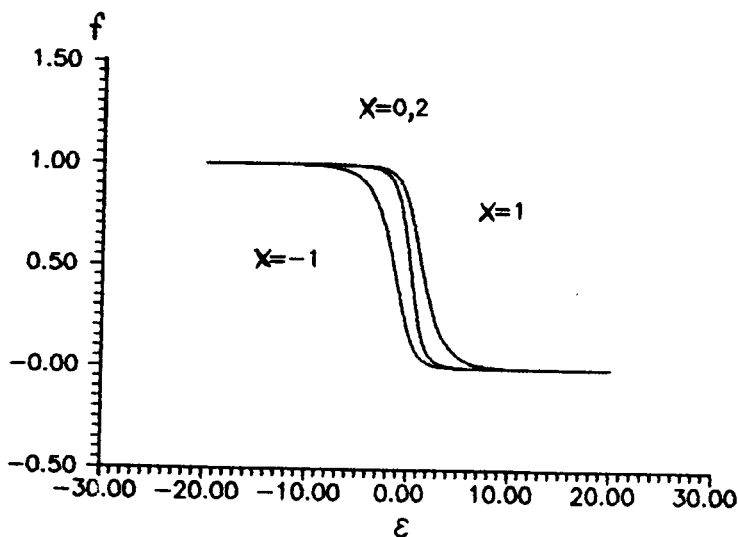


Рис.3. $E = 1$

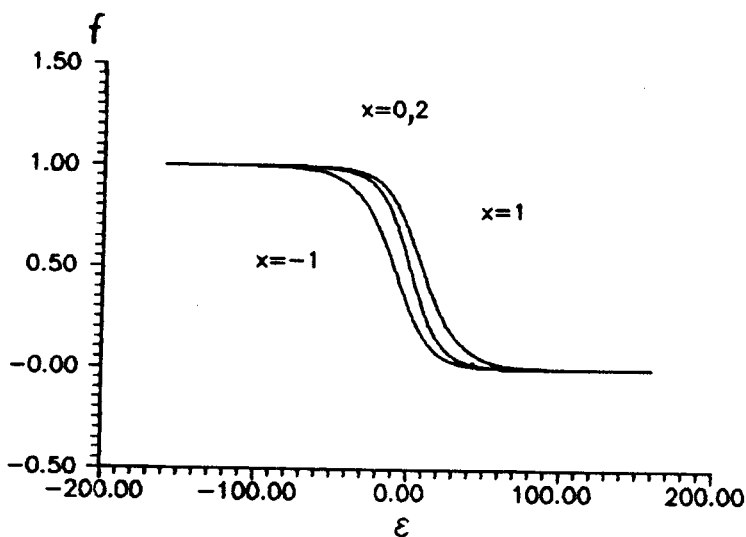


Рис.4. $E = 8$

Расчеты проводились на РС АТ-386. Время расчета одного варианта для размерности задачи $N = 101$, $M = 21$ составляло 10 — 15 мин.

В таблице 1 приведено сравнение вычисленных функций в зависимости от шага разбиения на равномерной сетке. Анализируя результаты

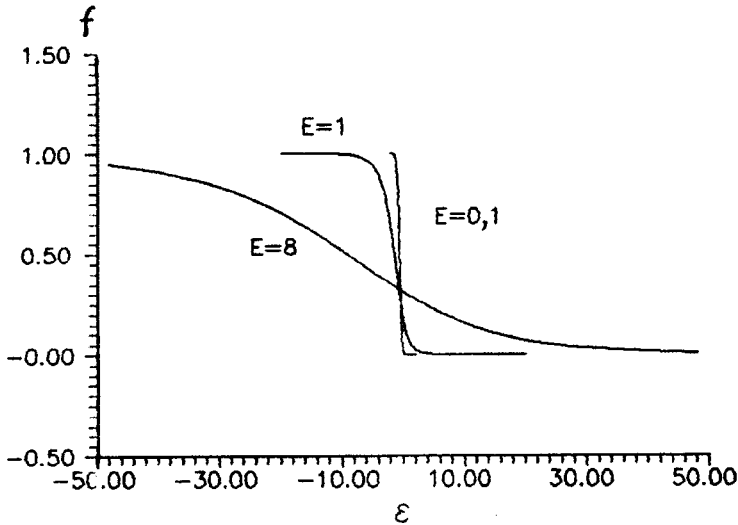


Рис.5. $x = -1$

Таблица 1. Значения функции $f(\varepsilon, x)$ и тока j в зависимости от шага сетки

по переменной ε . $\sigma = \frac{f_h - f_{h/2}}{f_{h/2} - f_{h/4}} f(\varepsilon, x), j(E)$ при $x = 1, E = 1$

	$h = 0,8$	$h/2$	$h/4$	σ
$\varepsilon = -8$	0,999147	0,997200	0,998609	3,8468
$\varepsilon = -4$	0,988170	0,984128	0,983141	4,0952
$\varepsilon = 0$	0,782367	0,753937	0,747165	4,2129
$\varepsilon = 4$	0,125817	0,142192	0,146341	3,9467
$\varepsilon = 8$	1,20209E-02	1,42375E-02	1,48589E-02	3,5671
j	0,564651	0,532269	0,524170	3,9983

расчетов, можно сделать вывод о наличии сходимости 2-го порядка для сеточного решения.

Для увеличения скорости сходимости итерационного процесса использовались неравномерные сетки по переменной ε со сгущением узлов в области сильного изменения функции.

В физических приложениях большой интерес вызывают значения наведенного тока j в проводнике:

$$j = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon x f(\varepsilon, x). \quad (4.1)$$

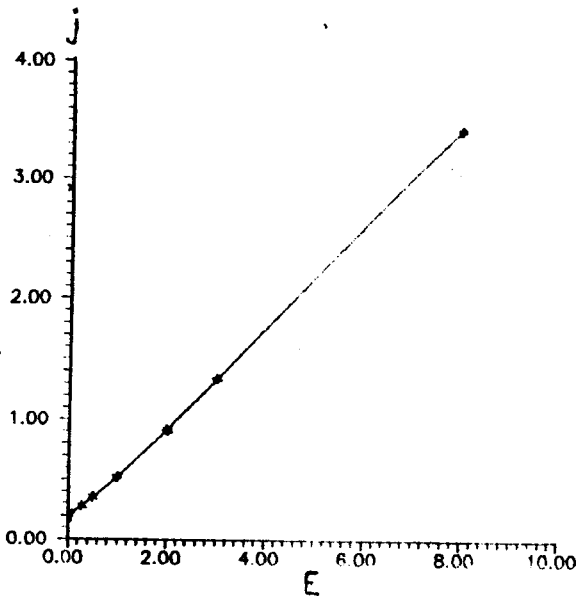


Рис.6

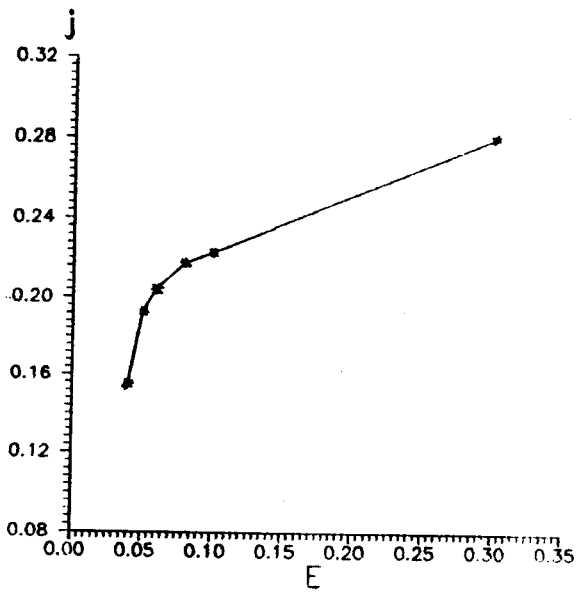


Рис.7

Используя условия (3.3)—(3.4), проинтегрировав n раз по частям по переменной ϵ , получаем для тока j следующее выражение:

$$j = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon x \frac{\epsilon^n}{n!} \frac{\partial^n f(\epsilon, x)}{\partial \epsilon^n}. \quad (4.2)$$

В результате решения нелинейной задачи по завершении итерационного процесса мы знаем как значения функции $f(\epsilon, x)$, так и значения вторых производных. Поэтому для вычисления тока j использовалась формула (4.2) при $n=2$.

На рис.6,7 приведены графики зависимости тока j от напряженности электрического поля E .

5. Выводы

Таким образом, численное решение кинетического уравнения (3.1)—(3.2) показывает, что, в отличие от решения этого уравнения в приближении времени релаксации [2], вид функции распределения f сложным образом зависит от величины электрического поля. Рис.2—4 демонстрируют, что ширина функции f зависит не только от величины поля E (рис.5), но и от направления импульса электрона. Это особенно наглядно иллюстрируют рис.8,9, где мы видим, что поверхность Ферми

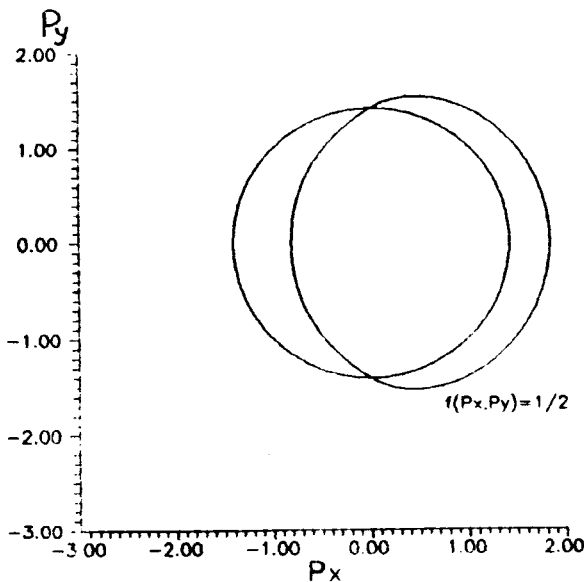


Рис.8. $E = 0,2$

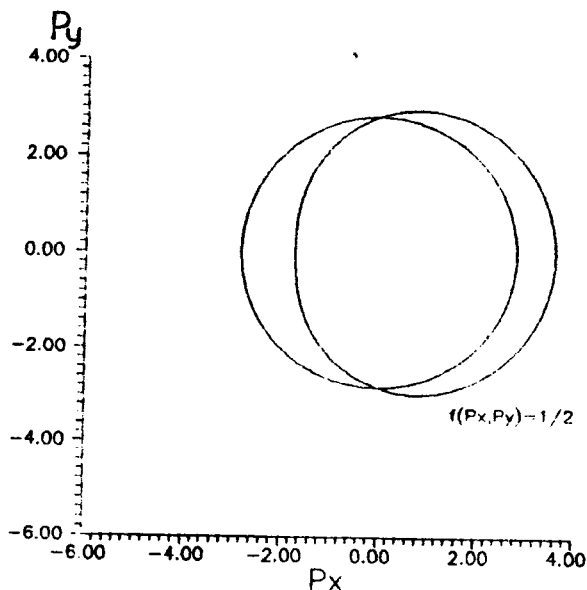


Рис.9. $E = 2$

состояния с током $f(p_x, p_y) = \frac{1}{2}$ сильно зависит от $\cos \theta$. Напомним, что в приближении времени релаксации эта поверхность имеет вид сферы, сдвинутой в направлении электрического поля.

На рис.6,7 представлены результаты расчета вольт-амперной характеристики. Мы видим, что при больших полях ток линейно растет с увеличением поля в соответствии с законом Ома, но при малых полях ($E < 0,1$ в безразмерных единицах) обнаруживается резкая нелинейность. К сожалению, при $E < 0,01$ возникают численные неустойчивости при вычислении наведенного тока, и мы не смогли получить корневой зависимости $j \sim \sqrt{E}$, которая следует из аналитических оценок. Заметим, что формула (4.1) описывает часть тока, наведенного полем. Полный ток, который следует сравнивать с экспериментом, есть $j_{\text{tot}} = env_d + j$.

Литература

1. Богод Ю.А. и др. — Физика низких температур, 1982, т.8, № 1, с.107—110.
2. Богод Ю.А. — Физика низких температур, 1982, т.8, № 8, с.787—829.

Рукопись поступила 25 ноября 1992 года.