УДК 539.275

О ВЫЧИСЛЕНИИ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ В ФОНОННОЙ ГИДРОДИНАМИКЕ

В.Д. Ходусов

310077 Харьков, пл. Свободы, 4 *Физико-технический факультет Харьковского госуниверситета*

Получены формулы для определения нижней границы значений кинетических коэффициентов в фононной гидродинамике чистых пьезодиэлектриков.

В чистых диэлектрических монокристаллах в области низких температур $T\langle\langle\theta_D$ (θ_D - температура Дебая), когда определяющими во взаимодействии фононов являются нормальные процессы с сохранением импульса (N - процессы), для описания кинетических явлений используются уравнения фононной гидродинамики [1,2]. В случае малых диссипаций эти уравнения имеют решение в виде слабозатухающих волн второго звука [3,4]. В уравнения фононной гидродинамики входят кинетические коэффициенты, с помощью которых в диэлектриках определяют затухание низкочастотного звука, коэффициент затухания второго звука, диэлектрическую релаксацию и т.д. Обычно используются оценки этих коэффициентов из соображений размерности с численными коэффициентами порядка единицы и не учитывают особенностей, которые могут возникать при вычислении этих коэффициентов типа “проблемы длинноволновых продольных фононов” Померанчука в явлении теплопроводности [5,6]. Однако, можно получить, используя обобщенную Н-теорему Больцмана [7,8], нижнюю границу значений кинетических коэффициентов в фононной гидродинамике, которая учитывает возникающие особенности и позволяет оценить порядки численных коэффициентов.

Рассмотрим пьезодиэлектрик, в котором волны первого и второго звуков можно возбуждать низкочастотным переменным электрическим полем. В них могут существовать связанные термоэлектромеханические волны (ТЭМ) [2]. Среди пьезодиэлектриков есть десять классов допускающих пироэлектричество, в которых волны второго звука могут возбуждаться непосредственно внешним электрическим полем [9]. Для изучения этих явлений нужно знать кинетические коэффициенты. При наличии слабонеоднородных низкочастотных внешних поля деформации и электрического поля E, удовлетворяющих условиям адиабатичности, частота фонона сорта j модулируется [1,2]

$$\omega^{(j)} = \omega_0^{(j)}\left(1 + \gamma_{ie}^{(j)}\xi_{ie} + \Lambda_i^{(j)}E_i\right), \qquad (1)$$

где $\omega_0^{(j)}$ — частота фонона в отсутствии внешних полей, ξ_{ie} — линейный тензор деформации, $\gamma_{ie}^{(j)}$ — тензор деформационного потенциала, $\vec{\Lambda}^{(j)}$ — вектор электрофонного потенциала. Эта модуляция приводит к отклонению функции распределения фононов $N^{(j)}$ от термодинамически равновесной $N_{oj} = \left(\exp(\hbar\omega_0^{(j)} / T_0) - 1\right)^{-1}$. Далее полагаем $\hbar = 1$. В диэлектрике все время протекают процессы взаимодействия фононов, стремящиеся восстановить равновесную функцию распределения, и благодаря им энтропия системы возрастает, а энергия внешних полей диссипирует в тепло [10].

Производство энтропии δQ в результате необратимых N — процессов связано с необратимыми потоками тепла $\vec{q}$, импульса π_{ie}, тензором диссипативных напряжений $\tilde{\sigma}_{ie}$ и диссипативной частью вектора индукции электрического поля $\vec{D}'$ соотношением [1,2]

$$\delta Q = (-\vec{q}\frac{\nabla T}{T_0} - \pi_{ie}\frac{\partial U_i}{\partial x_e} - \vec{D}'\dot{\vec{E}} + \tilde{\sigma}_{ie}\dot{\xi}_{ie})T_0^{-1}. \tag{2}$$

В случае малых градиентов температуры T, дрейфовой скорости фононов $\vec{U}$ и $\dot{\xi}_{ie}$, $\dot{\vec{E}}$ необратимые потоки $\vec{q}$, π_{ie} и $\tilde{\sigma}_{ie}$, $\vec{D}'$, согласно теоремы Онзагера [11], являются линейными функциями этих величин:

$$q_i = -\tilde{\kappa}_{ie}T_0\nabla\vartheta\,;\; \tilde{\sigma}_{ie} = \lambda_{iemn}\dot{\xi}_{mn} + \psi_{m,ie}\dot{E}_m + \mu_{iemn}\frac{\partial U_m}{\partial x_n};$$

$$D_i' = -\psi_{i,mn}\dot{\xi}_{mn} - \zeta_{im}\dot{E}_m - \alpha_{imn}\frac{\partial U_m}{\partial x_n}; \quad \pi_{ie} = -\mu_{mnie}\dot{\xi}_{mn} - \alpha_{m,ie}\dot{E}_m - \eta_{iemn}\frac{\partial U_m}{\partial x_n} \tag{3}$$

где $\tilde{\kappa}_{ie}$ — коэффициент фонон — гидродинамической теплопроводности, λ_{iemn}, η_{iemn}, μ_{iemn}, $\psi_{i,em}$, $\alpha_{i,em}$ — коэффициенты механической, фононной, упругофононной, электрической и электрофононной вязкостей, ζ_{ie} — коэффициент диэлектрической релаксации, $\vartheta = (T - T_0)/T_0$.

Подставляя (3) в (2), получим производство энтропии записанное через кинетические коэффициенты, как квадратичную форму относительно $\nabla\vartheta$, $\partial U_i/\partial x_e$, $\dot{\xi}_{ie}$, $\dot{\vec{E}}$.

$$\delta Q = \tilde{\kappa}_{ie}\nabla_i\vartheta\nabla_e\vartheta + (\eta_{iemn}\frac{\partial U_i}{\partial x_e}\frac{\partial U_m}{\partial x_n} + \lambda_{iemn}\dot{\xi}_{ie}\dot{\xi}_{mn} + \zeta_{ie}\dot{E}_i\dot{E}_e +$$

$$2\mu_{iemn}\dot{\xi}_{ie}\frac{\partial U_m}{\partial x_n} + 2\alpha_{m,ie}\dot{E}_m\frac{\partial U_i}{\partial x_e} + 2\psi_{m,ie}\dot{E}_m\dot{\xi}_{ie})T_o^{-1}. \tag{4}$$

Для нахождения δQ нужно знать решение кинетического уравнения Больцмана для фононной функции распределения. Однако, можно найти нижнюю границу производства энтропии и оценить кинетические коэффициенты если воспользоваться обобщенной H-теоремой Больцмана [7,8]

$$\delta Q \ge \left\langle \frac{\delta_j^2}{\sum\limits_n n\nu_j^{(n)}} \right\rangle \tag{5}$$

Здесь n — число взаимодействующих фононов, $\nu_j^{(n)} = 1/\tau_j^{(n)}$ — частота столкновений n фононов ($\tau_j^{(n)}$ - время релаксации), определяемое через функциональную производную от интеграла столкновений $\left(\dot{N}_j^{(n)}\right)_N$ по функции распределения δN_i. $\nu_j^{(n)} = -\frac{\delta\left(\dot{N}_j^{(n)}\right)_N}{\delta N_j}$, δ_j — определяет левую часть линеаризованного уравнения Больцмана

$$-N_{oj}\left(N_{oj}+1\right)\delta_j = \sum_{n=3}\left(\dot{N}_j^{(n)}\right)_N \tag{6}$$

и равна [2]

$$\delta_j = \frac{\omega_{oj}}{T_0}\left[-\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{g}_j\nabla\right)\left(\vartheta + \frac{\vec{k}\vec{U}}{\omega_{0j}}\right) + \gamma_{ie}^{(j)}\dot{\xi}_{ie} + \Lambda_i^{(j)}\dot{E}_i\right], \tag{7}$$

$\vec{g}_j = \partial\omega_{oj} / \partial\vec{k}$ — групповая скорость, скобки обозначают усреднение вида $< f_j > = \sum_j \sum_{\vec{k}} f_j N_{oj}\left(N_{oj}+1\right)$.

Используя уравнения бездиссипативной фононной гидродинамики [1,2], выразим $\dot{\vartheta}$ и $\dot{\vec{U}}$ через градиенты от ϑ, $\vec{U}$ и $\dot{\xi}_{ie}$, $\vec{E}$

$$\dot{U}_i = -T_0 S\tilde{\rho}_{in}^{-1}\nabla_i\vartheta\,; \; \dot{\vartheta} = -\frac{1}{C_v}\left[S\,div\vec{U} + \left(\lambda_{im}^{(E)}\dot{\xi}_{im} + \vec{p}^{(\xi)}\dot{\vec{E}}\right)\right], \tag{8}$$

где S — плотность фононной энтропии, C_V — фононная теплоемкость, $\tilde{\rho}_{in}^{-1}$ — обратный тензор фононной плотности, $\lambda_{im}^{(E)} = 1/T^2 < \omega_{oj}^2\gamma_{ie}^{(j)} >$ — температурный коэффициент напряжений, $\vec{p}^{(\xi)} = 1/T^2 < \omega_{oj}^2\vec{\Lambda}^{(j)} >$ — пироэлектрический коэффициент при постоянной деформации, который отличен от нуля для пироэлектриков. Подставляя (8) в (7), получим

$$\delta_j = \frac{\omega_{oj}}{T}\left[A_{ie}\frac{\partial U_e}{\partial x_i} + B_{ie}\dot{\xi}_{ie} + \left(\vec{C}\nabla\vartheta\right) + \left(\vec{G}\cdot\dot{\vec{E}}\right)\right] \tag{9}$$

Здесь введены следующие обозначения

$$A_{ie} = \left(\frac{S}{C_v}\delta_{ie} - \frac{g_i k_e}{\omega_{0j}}\right); \; B_{ie} = \left(\gamma_{ie}^{(\xi)} - \frac{\lambda_{ie}^{(E)}}{C_v}\right) \tag{10}$$

$$C_i = \left(\frac{TS}{\omega_{oj}}\tilde{\rho}_{ni}^{-1}k_n - g_i\right); \; G_i = \Lambda_i^{(j)} - \frac{p_i^{(\xi)}}{C_v}.$$

После подстановки (9) в выражение (5) и перехода от суммирования по $\vec{k}$ к интегрированию с учетом того, что интеграл от нечетной функции по волновому вектору $\vec{k}$ равен нулю, получим

$$\delta Q \ge \left\langle \frac{1}{\sum\limits_n n\nu_j^{(n)}}\frac{\left(\omega_0^{(j)}\right)^2}{T_0^2}\left[A_{il}A_{mn}\frac{\partial U_i}{\partial x_l}\frac{\partial U_m}{\partial x_m} + C_i C_l \nabla_i\vartheta\nabla_l\vartheta + B_{il}B_{mn}\dot{\xi}_{il}\dot{\xi}_{mn} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + G_i G_e \dot{E}_i\dot{E}_e + 2A_{ie}B_{mn}\frac{\partial U_i}{\partial x_e}\dot{\xi}_{mn} + 2A_{ie}G_m\frac{\partial U_i}{\partial x_e}\dot{E}_m + 2B_{ie}G_m\dot{\xi}_{ie}\dot{E}_m\right]\right\rangle \tag{11}$$

Сравнение между собой выражений (4) и (11) приводит к следующим минимальным значениям кинетических коэффициентов

$$\left(\tilde{x}_{ie}\right)_{\min} = \left\langle \frac{x^2}{\sum\limits_n n\nu^{(n)}}C_i C_e\right\rangle; \; \left(\eta_{iemn}\right)_{\min} = \left\langle \frac{T_0 x^2}{\sum\limits_n n\nu^{(n)}}A_{ie}A_{mn}\right\rangle;$$

$$\left(\lambda_{iemn}\right)_{\min} = \left\langle \frac{T_0 x^2}{\sum\limits_n n\nu^{(n)}}B_{ie}B_{mn}\right\rangle; \; \left(\zeta_{ie}\right)_{\min} = \left\langle \frac{T_0 x^2}{\sum\limits_n n\nu^{(n)}}G_i G_e\right\rangle; \tag{12}$$

$$(\mu_{iemn})_{\min} = \left\langle \frac{T_0 x^2}{\sum_n n\nu^{(n)}} A_{ie} B_{mn} \right\rangle; \quad (\alpha_{m,ie})_{\min} = \left\langle \frac{T_0 x^2}{\sum_n n\nu^{(n)}} G_m A_{ie} \right\rangle;$$

$$(\psi_{m,ie})_{\min} = \left\langle \frac{T_0 x^2}{\sum_n n\nu^{(n)}} G_m B_{ie} \right\rangle,$$

где $x = \dfrac{\omega_{0j}}{T}$.

Если ограничиться взаимодействием трех фононов ($n = 3$), то в зависимости от того как меняется частота столкновений $\nu_j^{(3)}$ как функция $\vec{k}$ для различных процессов интегралы (12) могут иметь особенности на нижнем пределе. Представим частоту столкновений в виде $\nu_j^{(3)}(k) = \nu_0 \sum_p \alpha_P^{(j)} f_P^{(j)}(x)$, где суммирование по P означает суммирование по возможным процессам с участием фононов сорта j, коэффициент $\alpha_P^{(j)} \approx 1$, $f_P^{(j)}(x)$ — функция, зависящая от типа процесса P и аргумента x, $\nu_0 = (1/32\pi)(T^5/\rho\overline{V}_S^5)$, $\overline{V}_S$ — средняя скорость звука, ρ — плотность кристалла.

В работе [1] приводятся порядковые оценки для $\gamma_{ie}^{(j)} \approx 1$, $\Lambda_i \approx \left(\rho\overline{V}_S^2\right)^{1/2}$. Подставляя значение величин S, C_V, $\tilde{\rho}_{ij}$ для фононного газа [2], получим следующие оценки кинетических коэффициентов

$$\eta_{iilmn} \sim \lambda_{ilmn} \sim \mu_{illmn} \sim T\left\langle \frac{x^2}{3\nu^{(3)}} \right\rangle \qquad \varsigma_{il} \sim \frac{T}{\rho\overline{V}_s^2}\left\langle \frac{x^2}{3\nu^{(3)}} \right\rangle \tag{13}$$

$$\alpha_{l,im} \sim \psi_{l,im} \sim \frac{T}{\left(\rho\overline{V}_s^2\right)^{1/2}}\left\langle \frac{x^2}{3\nu^{(3)}} \right\rangle \qquad \tilde{\kappa}_{il} \sim \overline{V}_s^2\left\langle \frac{x^2}{3\nu^{(3)}} \right\rangle$$

В модели приведенного изотропного кристалла [2] выражение $\left\langle \dfrac{x^2}{\nu^{(3)}} \right\rangle$ можно записать в следующем виде

$$\left\langle \frac{x^2}{\nu^{(3)}} \right\rangle = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{T}{\overline{\overline{V}}_s}\right)^3 \int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{\left(e^x - 1\right)^2}\left[\frac{1}{\nu_l^{(3)}(x)} + \frac{2}{\nu_t^{(3)}(x)}\right]dx \tag{14}$$

где $\nu_{l,t}^{(3)}(x)$ — частота столкновений поперечных (t) и продольных (l) фононов. В области значений $x << 1$ частота столкновений $\nu_l^{(3)}(x) \propto x^4$ [5], если учитывать процессы взаимодействия продольных и поперечных фононов, разрешенных строгими законами сохранения энергии и импульса. $l \Leftrightarrow l + t$, $l \Leftrightarrow t + t$. Подставляя ее в (14) легко видеть, что интеграл расходится на нижнем пределе. Особенности, возникающие здесь, имеют ту же природу, что и в “проблеме длинноволновых продольных фононов” Померанчука [5,6]. Как и при решении этой проблемы, существует ряд способов устранения расходимости. Если учесть дисперсию фононов $\omega^{(l,t)} = \left[1 + \xi_{l,t}(k)\right]kV_{l,t}$ и конечное время жизни тепловых фононов, то становятся возможным процессы взаимодействия трех продольных фононов $l \Leftrightarrow l + l$, которые устраняют возникающие особенности [12]. При положительной дисперсии продольных фононов $d/dk\left(\omega^{(l)}/k\right) > 0$, либо при малой отрицательной дисперсии

$A = \rho a^3 (\theta_D / T)^3 \left| \frac{d}{dk} \left(\omega^{(l)} / k \right) \right|_{k=T_0/\overline{V}_s} << 1$ (a - постоянная решетки), а также для кристаллов высокой симметрии, когда частота столкновений продольных фононов при наличии точек вырождения пропорционально квадрату частоты, величина $\left\langle x^2 / \nu^{(3)} \right\rangle$ равна

$$\left\langle \frac{x^2}{\nu^{(3)}} \right\rangle \approx \rho \frac{\overline{V}_s^2}{T_0^2} \tag{15}$$

и все кинетические коэффициенты, кроме $\tilde{\kappa}_{il}$, обратно пропорциональны температуре, а $\tilde{\kappa}_{il}$ обратно пропорционально квадрату температуры [1,2].

У изотропных кристаллов и кристаллов низкой симметрии, когда частота столкновений пропорциональна четвертой степени частоты продольных фононов, у которых дисперсия отрицательна и не мала ($A >> 1$), величина $\left\langle x^2 / \nu^{(3)} \right\rangle$ равна

$$\left\langle \frac{x^2}{\nu^{(3)}} \right\rangle \approx A^{1/4} \frac{\rho \overline{V}_s^2}{T_o^2} \tag{16}$$

Если для кристаллов низкой симметрии частота столкновений продольных фононов пропорциона кубу частоты, то

$$\left\langle \frac{x^2}{\nu^{(3)}} \right\rangle \approx \ln(A) \frac{\rho \overline{V}_s^2}{T_o^2} \tag{17}$$

Все это приводит к существенному изменению температурной зависимости всех кинетических коэффициентов и, так как $A >> 1$, к их увеличению. Для получения более точных значений кинетических коэффициентов в конкретных кристаллах нужно знать тензор деформационного потенциала $\gamma_{il}^{(j)}$ и вектор электрофононного потенциала $\vec{\Lambda}^{(j)}$ и зависимость $\nu^{(j)}$ от волнового вектора $\vec{k}$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] В.Л. Гуревич. Кинетика фононных систем, Наука, Москва, 1980.
[2] А.И. Ахиезер, В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов. ФНТ, 1994, **20** (12), с. 1199, ФНТ, 1995, **21** (1), с. 3.
[3] J.C. Ward and J.Wilks, Philos. Mag. 1952, **43,** 48.
[4] R.B. Dingle, Proc. Phys. Soc. London 1952, **65**, 1044.
[5] И.Я. Померанчук, ЖЭТФ, 1941, **11**, 246.
[6] И.Я. Померанчук, ЖЭТФ, 1942, **12**, 419.
[7] В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов, УФЖ, 1974, **19**, 688.
[8] В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов, в сб. Проблемы теоретической физики, Наукова думка, Киев, 1986, с. 22-28.
[9] В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов, ФТТ, 1986, **28**, 242.
[10] А.И. Ахиезер, ЖЭТФ, 1938, **8**, 1318.
[11] I. Onsager, Phys. Rev. 1931, **37**, 405; **38**, 2265.
[12] А.И. Ахиезер, В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов. ЖЭТФ, 1985, **88**, 866.