Доклады Академии Наук СССР
1953. Том XCIII, № 4

ФИЗИКА

А. И. РЕЗАНОВ и В. И. ЧЕРЕПАНОВ

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

(Представлено академиком И. П. Бардиным 2 X 1953)

Согласно представлениям, принятым в обменной $s-d$-модели ферромагнитного металла, внутренние электроны $3d$-оболочек атомов образуют добавочный резервуар помимо ионной решетки металла, с которым могут обмениваться энергией внешние электроны $4s$-оболочек атомов. Этот обмен должен приводить к добавочному теплосопротивлению. В данной работе мы хотим вычислить это теплосопротивление при низких температурах и сопоставить его с теплосопротивлением, которое оказывает ионная решетка.

Если в металле в направлении оси x имеется электрическое поле F и градиент температуры dT/dx, то условие стационарности для функций распределения внешних электронов $N(\vec{\xi})$ будет иметь вид:

$$\left.\frac{\partial N}{\partial t}\right|_F + \left.\frac{\partial N}{\partial t}\right|_{\nabla T} = -v_x \frac{\partial N_0}{\partial \varepsilon}\left[-eF + T\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\zeta}{T}\right) + \frac{\varepsilon}{T}\frac{dT}{dx}\right] = -\left.\frac{\partial N}{\partial t}\right|_{\text{ст}} =$$

$$= -A_{\vec{\xi}}\Big\{\sum_{\vec{\xi}',\mathbf{k}} |\mathbf{k}|^2\left[(n_\mathbf{k}+1)N(\vec{\xi}')(1-N(\vec{\xi})) - n_\mathbf{k}N(\vec{\xi})(1-N(\vec{\xi}'))\right]\delta\left[\varepsilon(\vec{\xi}') -\right.$$

$$\left. - \varepsilon(\vec{\xi}) - \hbar\omega_\mathbf{k}\right]\cdot\delta(\vec{\xi}' - \vec{\xi} - \mathbf{k}) + \sum_{\vec{\xi}'',\mathbf{k}} |\mathbf{k}|^2\left[n_\mathbf{k}N(\vec{\xi}'')(1-N(\vec{\xi})) -\right.$$

$$\left. - (n_\mathbf{k}+1)N(\vec{\xi})(1-N(\vec{\xi}''))\right]\delta\left[\varepsilon(\vec{\xi}'') - \varepsilon(\vec{\xi}) + \hbar\omega_\mathbf{k}\right]\delta(\vec{\xi}'' - \vec{\xi} + \mathbf{k})\Big\}, \quad (1)$$

где $A_{\vec{\xi}} = \frac{1}{\hbar} I_{sd} a^2$; I_{sd} — обменный интеграл для ближайших s- и d-электронов; a — константа решетки; $\vec{\xi}''$, $\vec{\xi}'$ и $\vec{\xi}$ — квази-импульсы s-электрона; $n_\mathbf{k}$ — равновесная функция распределения ферромагнонов; $\mathbf{k}$ — волновой вектор ферромагнона; $\hbar\omega_\mathbf{k}$ — энергия ферромагнона, равная $2I_{dd}a^2k^2$; I_{dd} — обменный интеграл ближайших d-электронов; v_x — составляющая скорости s-электрона по оси x; ε — энергия его; ζ — предельная энергия в распределении электронов; N_0 — равновесная функция распределения s-электронов. Для $N(\vec{\xi})$, как обычно, полагаем:

$$N(\vec{\xi}) = N_0(\vec{\xi}) + \xi_x \frac{\partial N_0}{\partial \varepsilon}\varphi(\varepsilon). \quad (2)$$

Подставляя (2) в (1), заменяя v_x на $\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \xi_x}$ и выполняя стандартные преобразования ([1]), сводим (1) к виду:

$$-\lambda\frac{\varepsilon}{\xi}\left(\frac{d\varepsilon}{d\xi}\right)^2\left[-eF+T\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\zeta}{T}\right)+\frac{\varepsilon}{T}\frac{dT}{dx}\right]=$$

$$=\int_0^\infty\frac{z\,dz}{e^z-1}\left\{\left[\varepsilon\varphi(\eta)-\varphi(\eta+z)\left(\varepsilon+\alpha z-\beta\frac{\varepsilon}{\xi^2}z\right)\right]\frac{e^\eta+1}{e^\eta+e^{-z}}+\right.$$

$$\left.+\left[\varepsilon\varphi(\eta)-\varphi(\eta-z)\left(\varepsilon-\alpha z-\beta\frac{\varepsilon}{\xi^2}z\right)\right]\frac{e^\eta+1}{e^{\eta-z}+1}\right\},\tag{3}$$

где $\lambda=\frac{32\pi^2I_{dd}^2a^2}{G^3\Omega_0I_{sd}^2(kT)^2}$; $z=\frac{\hbar\omega}{kT}$; $\eta=\frac{\varepsilon-\zeta}{kT}$; $\alpha=\frac{1}{2}kT$; $\beta=\frac{kT}{4I_{dd}a^2}$; $G^3\Omega_0$ — объем основной области кристалла; $\Omega_0\sim a^3$ — объем элементарной ячейки. При помощи формулы $\varepsilon=\hbar^2\xi^2/2m$ получаем:

$$\lambda\frac{\varepsilon}{\xi}\left(\frac{d\varepsilon}{d\xi}\right)^2=\lambda\frac{\hbar^3(2m)^{1/2}}{m^2}\varepsilon^{3/2}=\mu\varepsilon^{3/2}.\tag{4}$$

Решение уравнения (3) удобно представить в форме

$$\varphi(\eta)=-\mu\left\{\left[-eF+T\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\zeta}{T}\right)\right]\psi(\eta)+\frac{1}{T}\frac{dT}{dx}\chi(\eta)\right\}.\tag{5}$$

Подставляя (4) и (5) в (3) и приравнивая члены с $\left[-eF+T\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\zeta}{T}\right)\right]$ и затем с $\frac{1}{T}\frac{dT}{dx}$, получим уравнения для неизвестных функций $\psi(\eta)$ и $\chi(\eta)$, которые мы запишем объединенно:

$$\varepsilon^n=\int_0^\infty\frac{z\,dz}{e^z-1}\left\{\left[\varepsilon C^{(n)}(\eta)-C^{(n)}(\eta+z)\left(\varepsilon+\alpha z-\beta\frac{\varepsilon}{\xi^2}z\right)\right]\frac{e^\eta+1}{e^\eta+e^{-z}}+\right.$$

$$\left.+\left[\varepsilon C^{(n)}(\eta)-C^{(n)}(\eta-z)\left(\varepsilon-\alpha z-\beta\frac{\varepsilon}{\xi^2}z\right)\right]\frac{e^\eta+1}{e^{\eta-z}+1}\right\};\tag{6}$$

$$n={}^3/_2,\quad C^{(3/2)}(\eta)=\psi(\eta);\qquad n={}^5/_2,\quad C^{(5/2)}(\eta)=\chi(\eta).\tag{6'}$$

Для решения этого уравнения мы использовали метод, предложенный Кроллем ([1]): уравнение (6) умножается на

$$\frac{\eta^m}{(e^\eta+1)(1+e^{-\eta})},\quad m=0,1,2,\ldots,\tag{7}$$

и интегрируется по η. После этого интегралы, содержащие $C^{(n)}(\eta\pm z)$, преобразуются в интегралы, содержащие только $C^{(n)}(\eta)$, с помощью тождеств

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{F(\eta)}{1+e^{-\eta-z}}-\frac{F(\eta-z)}{e^{-z}+e^{-\eta}}\right\}\frac{d\eta}{e^\eta+1}=0;\tag{8}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{F(\eta+z)}{1+e^{-\eta-z}}-\frac{F(\eta)}{e^{-z}+e^{-\eta}}\right\}\frac{d\eta}{e^\eta+1}=0.\tag{8'}$$

После этих преобразований будем иметь:

$$b_{m+1}^{n}=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\varepsilon^{n}\eta^{m}e^{\eta}d\eta}{(1+e^{\eta})^{2}}=\int\limits_{0}^{\infty}\frac{z\,dz}{e^{z}-1}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\eta}{(1+e^{-\eta-z})(1+e^{\eta})}\{[\rho kTz(\eta+z)^{m}+$$

$$+\zeta(\eta^{m}-(\eta+z)^{m})][C^{(n)}(\eta)+(-1)^{m}C^{(n)}(-\eta)]+$$

$$+[kT\eta(\eta^{m}-(\eta+z)^{m})-{}^{1}/{}_{2}\,kTz(\eta+z)^{m}][C^{(n)}(\eta)-(-1)^{m}C^{(n)}(-\eta)]\}$$

$$(\rho=\hbar^{2}/8\pi I_{dd}a^{2}). \tag{9}$$

Нижний предел интегрирования по η, равный $(-\zeta/kT)$, заменен на $-\infty$.

Разлагая $C^{(n)}(\eta)$ в ряд по степеням η:

$$C^{(n)}(\eta)=\sum_{l=0}^{\infty}C_{l}^{(n)}\eta^{l} \tag{10}$$

и подставляя в (9), получим бесконечную систему уравнений для коэффициентов $C_{l}^{(n)}$:

$$b_{m+1}^{(n)}=\sum_{l=0}^{\infty}a_{lm}C_{l}^{(n)}, \tag{11}$$

где

$$a_{lm}=\int\limits_{0}^{\infty}\frac{z\,dz}{e^{z}-1}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\eta^{l}d\eta}{(e^{\eta}+1)(1+e^{-\eta-z})}\{[1+(-1)^{m+l}][\rho kTz(\eta+z)^{m}+$$

$$+\zeta(\eta^{m}-(\eta+z)^{m})]+[1-(-1)^{m+l}][-{}^{1}/{}_{2}\,kTz(\eta+z)^{m}+$$

$$+kT\eta(\eta^{m}-(\eta+z)^{m})]\}. \tag{12}$$

Для вычисления коэффициента теплопроводности оказывается достаточным взять в (11) три уравнения ($m=0, 1, 2$), а в правой части каждого из них — три первых члена. Решая эту систему уравнений, получим

$$C_{l}^{(n)}=D_{l}^{(n)}/D, \tag{13}$$

где $D_{l}^{(n)}$ и D — детерминанты третьего порядка.

При помощи (10), (6′) и (5) найдем:

$$\varphi(\eta)=-\mu\left\{\left[-eF+T\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\zeta}{T}\right)\right]\sum_{l=0}D_{l}^{(3/2)}\eta^{l}+\frac{1}{T}\frac{dT}{dx}\sum_{l=0}D_{l}^{(5/2)}\eta^{l}\right\}\frac{1}{D}. \tag{14}$$

Для вычисления коэффициента теплопроводности возьмем известные формулы для плотности электрического и теплового токов [2]:

$$I=2e\int\xi_{x}N(\varepsilon)\,d\Phi;\quad Q=m\int v^{2}\xi_{x}N(\varepsilon)\,d\Phi. \tag{15}$$

Подставляя (2) и (14) и проводя обычные преобразования, будем иметь:

$$I=\frac{e(2m)^{3/2}\mu}{3\pi^{2}\hbar^{4}D}\left\{\left[-eF+T\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\zeta}{T}\right)\right]\sum_{l=0}^{2}D_{l}^{(3/2)}b_{l+1}^{(3/2)}+\frac{1}{T}\frac{dT}{dx}\sum_{l=0}^{2}D_{l}^{(5/2)}b_{l+1}^{(3/2)}\right\}, \tag{16}$$

$$Q=\frac{(2m)^{(5/2)}\mu}{3\pi^{2}\hbar^{4}D}\left\{\left[eF+T\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\zeta}{T}\right)\right]\sum_{l=0}^{2}D_{l}^{(3/2)}b_{l+1}^{(5/2)}+\frac{1}{T}\frac{dT}{dx}\sum_{l=0}^{2}D_{l}^{(5/2)}b_{l+1}^{(5/2)}\right\}. \tag{17}$$

Полагая $I=0$, определяя из этого условия внутреннее электрическое поле F и подставляя в (17), получим окончательное выражение для Q:

$$Q=-\frac{(2m)^{3/2}\mu(T)}{3\pi^{2}\hbar^{4}T}\frac{K_{1}K_{3}-K_{2}K_{2}'}{DK_{1}}\frac{dT}{dx}, \tag{18}$$

где

$$K_1 = \sum_{i=0}^{2} D_i^{(3/2)} b_{i+1}^{(3/2)}; \quad K_3 = \sum_{i=0}^{2} D_i^{(5/2)} b_{i+1}^{(5/2)};$$
$$K_2 = \sum_{i=0}^{2} D_i^{(5/2)} b_{i+1}^{(3/2)}; \quad K_2' = \sum_{i=0}^{2} D_i^{(3/2)} b_{i+1}^{(5/2)}. \tag{19}$$

При вычислении (18) мы ограничились членами с низшими степенями T.

$$K_1K_3 - K_2K_2' = (kT)^3 \frac{32\pi^4}{9} \rho\zeta^9 \beta_{11} (\alpha_{00}\beta_{22} - \beta_{02}\alpha_{20}) \left(\frac{\pi^2}{3}\beta_{02} - 2\beta_{22}\right);$$
$$DK_1 = (kT)\, 64\rho\zeta^7\beta_{11}^2 (\alpha_{00}\beta_{22} - \beta_{02}\alpha_{20}) \left(\frac{\pi^2}{3}\beta_{02} - 2\beta_{22}\right); \tag{20}$$

α и β — интегралы, содержавшиеся в a_{im} (12).

Таким образом, для теплопроводности $\varkappa_{fm}$ получаем окончательно:

$$\varkappa_{fm} = \frac{64\pi^4\zeta^2}{27\hbar a\beta_{11}} \left(\frac{I_{dd}}{I_{sd}}\right)^2 \frac{1}{T}, \tag{21}$$

$$\beta_{11} = \int_0^\infty \frac{z^2 dz}{e^z - 1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta\, d\eta}{(e^\eta + 1)(1 + e^{-\eta - z})} = \frac{2\pi^4}{15} \simeq 13; \tag{22}$$

$I_{dd} = k\theta_C$; θ_C — температура Кюри.

Формула (21) была получена нами с теми же приближениями, с которыми вычисляется по одноэлектронной модели металла теплопроводность электронов при низких температурах, взаимодействующих только с решеткой:

$$\varkappa_{ph} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} \frac{32\pi^3 M\zeta^2 ak^3\theta_D^4}{81\cdot 124{,}4\hbar^3C^2T^2}; \tag{23}$$

M — масса иона; θ_D — температура Дебая; C — средняя кинетическая энергия электрона в поле ионов решетки.

Отношение, $\varkappa_{fm}$ к $\varkappa_{ph}$ например, для Fe $M = 56\cdot 1840\cdot 10^{-27}$ г, $\theta_C = 1{,}043\cdot 10^3$ °K, $\theta_D = 4{,}2\cdot 10^2$ °K, $a \sim 10^{-8}$ см, оказывается равным:

$$\frac{\varkappa_{fm}}{\varkappa_{ph}} \simeq 6{,}5\cdot 10^{-4} \left(\frac{C}{I_{sd}}\right)^2 T. \tag{24}$$

Есть основания полагать, что C имеет порядок величины 10^{-12} эв (см. ([1]), стр. 180), а $I_{sd} \sim I_{dd} \sim 10^{-13}$ эв; тогда:

$$\frac{\varkappa_{fm}}{\varkappa_{ph}} \simeq 6{,}5\cdot 10^{-2} T. \tag{25}$$

Таким образом, при температурах $\sim 10°$ K «ферромагнонное» теплосопротивление $1/\varkappa_{fm}$ должно играть преобладающую роль.

С. В. Вонсовским и Е. А. Туровым показано, что $(s-d)$-обменная модель в форме, использованной выше, вытекает из самой общей многоэлектронной теории кристалла ([3]), если пренебречь взаимодействием между внешними s-электронами (обычное одноэлектронное приближение) и полярными состояниями для внутренних d-электронов.

Приносим благодарность проф. С. В. Вонсовскому за постоянное внимание к данной работе.

Уральский государственный университет
им. А. М. Горького

Поступило
29 XII 1952

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] А. Вильсон, Квантовая теория металлов, гл. 6, М.— Л., 1941. [2] Г. Бете, А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, М.— Л., 1938. [3] Н. Н. Боголюбов, Лекции по квантовой статистике, Киев, 1949 (на укр. яз.).