**РОЛЬ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ**

**ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ**

**КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД**

Палчаев Д.К., Мурлиева Ж.Х., Исхаков М.Э., Гаджимагомедов С.Х.,

Рабаданов М.Х., Фараджева М.П., Мурлиев Э.К.

*Дагестанский государственный университет, РФ, 367000,*

*Махачкала, ул. М.Гаджиева, 43а,* *dairpalchaev@mail.ru*

Явление электросопротивления материалов обусловлено рассеянием носителей заряда на нарушениях строгой периодичности потенциала решетки атомов за счет тепловых возбуждений при Т > 0К и присутствия различного рода статических дефектов. Энергия элементарных зарядовых возбуждений, возникающих при приложении внешнего электрического поля, в результате взаимодействия с нарушениями строгой периодичности потенциала передается решетке. Решетка излучает эту энергию − джоулева теплота. Заметим, эта энергия выделяется не мгновенно. Для каждого материала характерна определенная инерционность процесса при формировании излучаемой атомами энергии, связанная с соответствующим вкладом ангармонизма колебаний. Подобный механизм [1-3] приводит к различной конечной фононной теплопроводности материалов. При гармонических колебаниях фононная теплопроводность бесконечна. Электросопротивление чистых, бездефектных металлов равно нулю при температуре Т ≈ 0К в результате приобретения блоховскими функциями носителей заряда свойство симметрии [4] периодического потенциала. Потенциал межатомного взаимодействия при этой температуре можно считать симметричным, чем и обеспечивается строгая периодичность потенциала решетки атомов, совершающих нулевые колебания. В этом случае ангармонический вклад, определяющий диссипацию энергии колебаний атомов и решетки в целом, близок к нулю. Вероятность перехода к состоянию с нулевым сопротивлением возрастает при понижении температурной хаотизации колебания атомов и приближении потенциала межатомного взаимодействия, в целом по решетке, к состоянию строгой симметричности. Поскольку ангармонизм колебаний, обуславливающий рассеяние энергии решетки приводит и к неравенству нулю коэффициента теплового расширения (КТР) [3], то эффект строгой симметричности этого потенциала, выше 0К, следует ожидать, для многих материалов [5], при инверсии знака КТР. Симметричность потенциала межатомного взаимодействия, в целом по решетке, при *Т* ≠ 0К, так же как и при *Т* ≈ 0К, обеспечивает наивысшую добротность системы атомов и снижение рассеиваемой энергии при соответствующих колебаниях атомов. Свободные носители заряда или «фиктивные» заряды в оксидах, наличие, которых связывается с проводимостью материалов в случае *Т* ≠ 0К, так же как и при Т ≈ 0К, участвуют в обеспечении равенства сил межатомного притяжения и отталкивания. Равенство нулю КТР означает, что ангармонизм колебаний решетки атомов, в целом, в данном равновесном состоянии системы равен нулю, т.е. потенциал межатомного притяжения равен потенциалу их отталкивания. При этом полная энергия системы должна сохранятся. Казалось бы, система в этом состоянии не должна была излучать. Однако на практике такого эффекта при температуре инверсии знака КТР не наблюдается. Это объясняется тем, что инверсия знака линейного (так же, как и объемного) КТР характерна для решетки атомов в целом в результате усреднения эффектов, связанных с особенностями строения соответствующих решеток. Тогда как потенциал непосредственного межатомного взаимодействия a priori ассиметричен. Эта асимметрия обеспечивает поглощение и излучение энергии в относительно замкнутой системе атомов, каковой является конденсированное состояние. Таким образом, вероятность рассеяния элементарных зарядовых возбуждений, возникающих при приложении внешнего электрического поля, определяется как температурной хаотизацией колебаний атомов, так и инерционностью процесса формирования излучаемой атомами энергии. Последнее, задается соответствующим вкладом ангармонизма колебаний.

 Эти представления адекватны модели, представленной авторами работы [4], для развития теории электрон-фононного взаимодействия. В этой модели для нахождения матричного элемента, отражающего искажения кристаллического потенциала элементарными тепловыми возбуждениями, предусматривается наличие макро- и микро полей. Первое рассматривается как среднее по решетке, а второе обеспечивает периодичность в области усреднения, отличающуюся от потенциала идеальной решетки.

Роль температурной хаотизации колебаний при формировании потенциала рассеяния носителей заряда ясна, поскольку имеется хорошо проработанная теория электросопротивления проводников, рассматривающая возрастание хаотизации тепловых возбуждений решетки атомов. Однако она не позволяет проводить количественные оценки без привлечения эмпирических данных по другим свойствам даже для простых металлов. Более того, наблюдается кризис этой теории в вопросах установления природы сверхпроводимости и интерпретации отрицательного температурного коэффициента электросопротивления некоторых металлических сплавов [6]. Это, как мы покажем ниже, может быть связано с тем, что используемый в этой теории потенциал неадиабатичности, нарастание которого характеризирует температурную зависимость электросопротивления, не включает части неадиабатичности, связанной с изменением межатомного расстояния. Пренебрежение этой частью, до последнего времени, связывалось с малостью изменения объема решетки (~10%) от 0К до температуры плавления по сравнению с изменением удельного электросопротивления (на семь и более порядков) в этом же интервале температур. В то же время, изменения объема всего на десять процентов приводят к разрушению решетки, и можно легко себе представить, что настолько же порядков величины должна измениться константа (для каждого равновесного состояния) теоретического деформационного потенциала [4], связанного с деформацией решетки.

 Из теоремы вириала для конденсированных сред [7]:

3*PV*/2 = 2*Ek*+*Ep* (1)

следует, что относительное изменение полной энергии (*Е*=2*Еk*+*Еp*) тепловых возбуждений решетки атомов, с точностью определения выражения (1), равно коэффициенту объемного теплового расширения (βi) для каждого i-того равновесного состояния:

β(*Т*)i⋅*Ti* = (d*E/E*d*T*)i⋅*T*i, (2)

откуда видно, что объемная термическая деформация в выражении (2) при каждой температуре *T*i равна производной относительного значения полной энергии *Е* по температуре при *T*i. Поскольку рост относительного значения полной энергии (d*E/E*d*T*)i происходит в результате роста тепловых возбуждений, то связь температурной зависимости электросопротивления с температурной зависимостью КТР оказывается очевидной. Правая часть уравнения (2), на практике, иногда принимает отрицательные значения, следовательно, и левая часть может принять отрицательные значения. В этом случае следует ожидать не повышение, а снижение эффекта рассеяния элементарных зарядовых возбуждений с увеличением температуры. В связи с чем, представляются интересными вопросы: какова роль β в формировании потенциала рассеяния носителей заряда и, что следует ожидать в случаях, когда β претерпевает инверсию знака и приобретает отрицательные значения? Таким образом, оказывается, что наш второй вопрос имеет основание, так как из принятой модели, на которой основывается теория электросопротивления, не следует переход проводников в сверхпроводящее состояние и это может быть потому, что пренебрегается факт изменения объема решетки. Роль β в формировании потенциала рассеяния носителей заряда, т.е. рассмотрение первого вопроса, нами представлена в работах [8,9]. На большом числе проводников (более 30 металлов и сплавов) показано, что удельное электросопротивление, абсолютное значение которого сложным образом (от ρ ~*Т*5 до ρ ~*Т*1) изменяется на семь и более порядков в интервале от 0К до температуры плавления, описывается уравнением:

ρ(Т) = ρ0 + ρph =ρ0+ρ\*β*T*, или ρph /β*T* =ρ\* = *сonst.* (3)

Здесь ρ0 **–** остаточное электросопротивление при *T* = 0K; ρph и ρ\* – фононное (динамическое) и характеристическоеэлектросопротивления соответственно; β*T*=(d*V*/*V*d*T*) − термическая деформация. Интерпретация этой связи на основе феноменологической теории представлена в [8]. Заметим, эта связь выполняется вплоть до сверхпроводящего перехода.

Приведем физические соображения о связи ρph*(T)* с β*T* в рамках микроскопической теории фононного электросопротивления. Исходная формула для расчета удельного электросопротивления проводников:

(4)


где *ℓi = 1/siNi*  − длина свободного пробега, ограничиваемая рассеянием квазичастиц на тепловых возбуждениях решетки **в** *i*-том состоянии системы, здесь *si* - сечение центра рассеяния, *Ni* - концентрация рассеивающих центров. Характеристическая длина свободного пробега *ℓ\* ≈ 1/x0*, где *x0* –межатомное расстояние. *si*  определяется значением экранированного потенциала ϕ*i*= ε*i*q/x*i* иона в решетке, с которым взаимодействует квазичастица. Значение ε*i* такое, что ε →0 и ε → ε*max* при T →0*K* и *T* →*Tmax* соответственно. Таким условиям удовлетворяет значение относительного изменения концентрации числа обобществленных, в том числе, экранирующих зарядов (*n*0 – *n*i)/*n*0, здесь *n0*и*ni*  - концентрации этих зарядов при температурах *T*= 0*K* и *T*=*Ti* . Для изотропного случая и при неизменном числе обобществленных зарядов имеем:

ε*i* = (*n*0 – *ni*)/*n*0 = (*Vi* – *V*0)/*Vi* = 3(*xi* – *x0*)/*xi* . (5)

 Энергия взаимодействия электрона с таким потенциалом для каждого из *i* - тых равновесных состояний металла представляется как:

 (6)

а изменение этого взаимодействия с температурой, определяющее **s(T),**  как:

 (7)

Приведенное в работе обоснование определяющей роли термической деформации решетки атомов в формировании сечения рассеяния элементарных зарядовых возбуждений в проводниках открывает перспективу решения проблем: установления природы сверхпроводимости и интерпретации отрицательного температурного коэффициента электросопротивления некоторых металлических сплавов.

Работа выполнена в рамках Гос. заданий №16.1103.2014/К № 2560 и Программы стратегического развития ФГБОУ ВПО «Дагестанский государственный университет».

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Займан *Электроны и фононы*. Иностр. Лит., Москва, 1962.
2. Дж. Драбл, Дж. Голдсмид. *Теплопроводность полупроводников*. Иностр. Лит., Москва, 1963.
3. Дж. Рейсленд. *Физика фононов*. Мир, Москва, 1975.
4. В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*. Наука, Москва, 1984.
5. G. D. Barrera, J. A. O. Bruno, T.H.K.Barron, N. L. Allan. *J. Phys.: Condens. Matter* **17** (2005) R217.
6. В.Ф. Гантмахер *Электроны в неупорядоченных средах*. М.: Физмат. 2003.
7. Дж. Слетер. *Диэлектрики, полупроводники, металлы*. Мир, Москва, 1969
8. I.M. Abdulagatov, Zh.Kh. Murlieva., D.K. Palchaev et.al. *J. of Physics and Chemistry of Solids*. **68** (2007) 1713.
9. Д.К. Палчаев, Ж.Х.Мурлиева, К.К. Казбеков. *Ж. ТВТ.* **45** 5 (2007) 1.