Доклады Академии наук СССР
1972. Том 203, № 4

УДК 537.311/.312 *ФИЗИКА*

Член-корреспондент АН СССР Ю. КАГАН, В. Н. ФЛЕРОВ

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СОПРОТИВЛЕНИЯ ЧИСТОГО МЕТАЛЛА

1. Проблема низкотемпературного поведения сопротивления идеально чистого металла, по-видимому, до конца не проанализирована, по крайней мере, насколько можно заключить из известных публикаций. В первую очередь это касается ситуации со сложной поверхностью Ферми, когда последняя пересекает границу зоны Бриллюэна, оставаясь закрытой или, наоборот, образуя открытую поверхность. В этом случае было трудно непосредственно использовать классические рассуждения Пайерлса (см., например, ([1])), и вопрос об увлечении и поведении сопротивления при низких температурах оставался открытым.

Ниже приводится некий общий анализ, позволяющий единым образом исследовать все возможные случаи. При этом рассматривается бесконечный кристалл без примесей и учитывается только электрон-фононное и фонон-фононное взаимодействия.

2. Для изучения поведения сопротивления металла при низких температурах воспользуемся только вариационным принципом, непосредственно вытекающим из квазиклассического уравнения Больцмана, и такими общими свойствами функции распределения электронов $f(\mathbf{p}, n)$, как ее непрерывность и периодичность в пространстве обратной решетки.

Система линеаризованных кинетических уравнений для электрон-фононной системы может быть записана в символическом виде

$$N = \hat{L}_{\mathrm{e,\,ph}}(\varphi, \chi), \qquad 0 = \hat{L}_{\mathrm{ph,\,e}}(\chi, \varphi) + \hat{L}_{\mathrm{ph,\,ph}}(\chi), \tag{1}$$

где $\hat{L}$ — соответствующие операторы столкновений, φ и χ связаны с поправками к функции распределения электронов $f^{(1)}$ и фононов $g^{(1)}$ соотношениями

$$f^{(1)}(\mathbf{p}, n) = -\frac{\partial f^{(0)}(\mathbf{p}, n)}{\partial \varepsilon(\mathbf{p}, n)}\,\varphi(\mathbf{p}, n); \qquad g^{(1)}(\mathbf{q}, \alpha) = -\frac{\partial g^{(0)}(\mathbf{q}, \alpha)}{\partial \omega(\mathbf{q}, \alpha)}\,\chi(\mathbf{q}, \alpha).$$

Умножая первое уравнение на φ, а второе на χ и интегрируя

$$\begin{gathered} \langle \varphi, N \rangle = \langle \varphi, \hat{L}_{\mathrm{e,\,ph}}(\varphi, \chi) \rangle, \\ 0 = \langle \chi, \hat{L}_{\mathrm{ph,\,e}}(\chi, \varphi) \rangle + \langle \chi, \hat{L}_{\mathrm{ph,\,ph}}(\chi) \rangle, \end{gathered} \tag{2}$$

найдем общее выражение для сопротивления в форме (член, соответствующий электрон-фононному взаимодействию, выписан в явном виде)

$$\rho = \frac{\dfrac{1}{T}\displaystyle\iiint W(\mathbf{k}, \varkappa; \mathbf{k}')\,(\varphi(\mathbf{k}) - \varphi(\mathbf{k}') + \chi(\varkappa))^2\, dk'\, dk\, d\varkappa + \langle \chi, \hat{L}_{\mathrm{ph,\,ph}}(\chi) \rangle}{\left| e \displaystyle\int (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{u})\, f^{(1)}(\mathbf{k})\, d\mathbf{k} \right|^2}; \tag{3}$$

здесь под $\mathbf{k}$ подразумевается совокупность $\mathbf{p}$, n, а под $\varkappa$ — $\mathbf{q}$, α; интегрирование по $d\mathbf{k}$ и $d\varkappa$ означает соответственно интегрирование по $d\mathbf{p}$ и $d\mathbf{q}$ и суммирование по n и α; $\mathbf{u}$ — единичный вектор в направлении электрического поля; остальные обозначения стандартные. Из вида (2) и положительной определенности (3) легко найдем, что для любого приближенного значения функций $\tilde{\varphi}$ и $\tilde{\chi}$, удовлетворяющих (2), истинное значение сопротивления ρ и приближенное $\tilde{\rho}$ всегда связаны неравенством

$$\rho \leqslant \tilde{\rho}. \tag{4}$$

Соответствующий вариационный принцип (ср., например, [2]), если $\tilde{\varphi}$ и $\tilde{\chi}$ выбраны в виде суперпозиции некоторых известных функций $\tilde{\varphi}_s$ и $\tilde{\chi}_t$:

$$\tilde{\varphi} = \sum_s a_s \tilde{\varphi}_s, \quad \tilde{\chi} = \sum_t b_t \tilde{\chi}_t,$$

приводит к следующему выражению для $\tilde{\rho}$:

$$\tilde{\rho} = \left(\sum_{ss'} I_{s'} \tilde{L}_{s,s'}^{-1} I_s \right)^{-1}, \tag{5}$$

где

$$I_s = \langle \tilde{\varphi}_s, N \rangle; \quad \tilde{L}_{s\,s'} = L_{ss'} - \sum_{tt'} L_{s't} L_{tt'}^{-1} L_{t's},$$

$$L_{tt'} = L_{t,t'}^{\mathrm{e,ph}} + \langle \tilde{\chi}_t, \hat{L}_{\mathrm{ph,ph}} (\tilde{\chi}_{t'}) \rangle, \tag{6}$$

$$L_{ss'} = \frac{1}{T} \iiint W(\mathbf{k}, \varkappa;\ \mathbf{k}') \left(\tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}) - \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}') \right) \left(\tilde{\varphi}_{s'}(\mathbf{k}) - \tilde{\varphi}_{s'}(\mathbf{k}') \right) d\mathbf{k}\, d\mathbf{k}'\, d\varkappa,$$

а L_{st} и $L_{tt'}^{\mathrm{e,ph}}$ получается из $L_{ss'}$ путем замены на $\tilde{\chi}_t(\varkappa)$ соответственно одного или двух множителей $(\tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}) - \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}'))$. Выражения (3) и (5) в сочетании с неравенством (4) позволяют проанализировать низкотемпературное поведение сопротивления при любой форме поверхности Ферми. При этом принципиальным является требование, чтобы приближенный вид функции распределения $\tilde{\varphi}$ не противоречил условию непрерывности и периодичности в обратном пространстве. Одновременно следует помнить, что в выражении для сопротивления металла фигурируют лишь значения $\tilde{\varphi}$ на поверхности Ферми.

3. Рассмотрим сначала ситуацию, когда нет открытой поверхности Ферми. Здесь возможен ряд случаев.

а) Пусть поверхность Ферми распадается на односвязные куски, которые лежат целиком внутри ячейки Бриллюэна. Тогда достаточно выбрать одномоментное приближение для $\tilde{\varphi}$ и $\tilde{\chi}$ с пробными функциями

$$\tilde{\chi}_1 = \mathbf{qu}, \tag{7}$$

$$\tilde{\varphi}_1 = \mathbf{pu}. \tag{7'}$$

Вне поверхности Ферми мы можем продолжить функцию распределения произвольным образом, в силу чего выбор $\tilde{\varphi}_1$ в форме (7) не вступает в противоречие с требованиями ее непрерывности и периодичности. Из (5) следует, что в пренебрежении процессами переброса, решение в форме (7) и (7′) приводит к $\tilde{\rho} = 0$, а следовательно, согласно (4), к равенству нулю истинного сопротивления. Таким образом, в этом случае конечное ρ возникает только за счет процессов переброса, и сопротивление зависит от температуры экспоненциально в соответствии с известным результатом [3] (член в (5), обязанный фонон-фононному взаимодействию, в случае (7) также приводит к экспоненциально малому вкладу за счет процессов переброса. но уже в фононной системе).

б) Пусть теперь отдельные куски поверхности Ферми пересекаются с гранями зоны Бриллюэна. Для тех из них, которые не имеют точек, разделенных вектором обратной решетки, рассеяние с переходом с одного куска на другой требует фонона с конечным импульсом и приводит к экспоненциальной добавке в сопротивлении. Выделенными оказываются только куски, прилегающие к противоположным граням зоны Бриллюэна. Для них есть целые линии точек на поверхности Ферми, отличающиеся друг от друга на вектор обратной решетки $\mathbf{G}_1$. В этом случае закон сохранения квазиимпульса

$$\mathbf{p}' - \mathbf{p} = \mathbf{q} + \mathbf{G}_1 \tag{8}$$

при перебросе с одного куска на другой может быть выполнен при сколь угодно малом значении $\mathbf{q}$.

Для того чтобы показать, что и в этом случае фононы с малым $\mathbf{q}$ не создают сами по себе конечного сопротивления, воспользуемся снова одномоментным приближением с $\widetilde{\chi}_1$, согласно (7), и с $\widetilde{\varphi}_1$, принимающим вблизи поверхности Ферми на этих двух кусках значения

$$\widetilde{\varphi}_1' = (\mathbf{p} - {}^1/_2\mathbf{G}_1)\,\mathbf{u}, \qquad \widetilde{\varphi}_1'' = (\mathbf{p} + {}^1/_2\mathbf{G}_1)\,\mathbf{u}. \tag{9}$$

В таком виде $\widetilde{\varphi}_1$ удовлетворяет периодичности по $\mathbf{G}_1$ (если кусок поверхности Ферми пересекает сразу две или три грани зоны Бриллюэна, то ${}^1/_2\mathbf{G}_1$ в (9) должно быть заменено соответственно на ${}^1/_2(\mathbf{G}_1 \pm \mathbf{G}_2)$ или на ${}^1/_2(\mathbf{G}_1 \pm \mathbf{G}_2 \pm \mathbf{G}_3)$). Аналогичная форма должна быть выбрана для всех остальных кусков, за исключением лежащих полностью внутри зоны, для которых нужно использовать вид (7). Непрерывность функции распределения по всем направлениям снова может быть обеспечена соответствующим выбором функции вне поверхности Ферми.

При подстановке $\widetilde{\varphi}_1$ в форме (9) и $\widetilde{\chi}_1$ в форме (7) в (5) нетрудно убедиться, что вклад члена, соответствующего в интеграле столкновений перебросу с $\mathbf{G} = \mathbf{G}_1$, за счет (8) строго обращается в 0. Это означает, что рассматриваемое рассеяние может дать конечное сопротивление только при учете членов с $\mathbf{G} \neq \mathbf{G}_1$, которые экспоненциально малы. Поскольку роль других процессов рассеяния остается такой же, как и в случае 1), то с учетом (4) приходим к утверждению, что в отсутствие открытых поверхностей сопротивления должно подчиняться экспоненциальному температурному закону (см., однако, ниже случай строгого равенства числа электронов и дырок).

4. При наличии открытой поверхности картина принципиально меняется. В этом случае снова на пересечении с противоположными гранями зоны Бриллюэна лежат точки поверхности Ферми, отличающиеся на вектор обратной решетки. Однако теперь мы не можем выбрать пробную функцию линейной по $\mathbf{p}$, ибо это соответствовало бы нарушению либо непрерывности, либо периодичности $\widetilde{\varphi}(\mathbf{p}, n)$. Это утверждение относится и к истинной функции $\varphi(\mathbf{p}, n)$, фигурирующей в общем выражении (3). Легко сообразить, что при этом область малых $\mathbf{q}$ не может быть тождественно исключена из этого выражения при учете интегрирования по всей поверхности Ферми. Рассматривая ее вклад и учитывая периодичность $\varphi(\mathbf{p}, n)$,

$$\varphi(\mathbf{p}', n) - \varphi(\mathbf{p}, n) = \frac{\partial\varphi(\mathbf{p}, n)}{\partial\mathbf{p}}\,\mathbf{q}.$$

Поскольку $\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{p}, n)}{\partial\mathbf{p}} \neq \mathrm{const}$ вдоль всей поверхности Ферми, то при малых $\mathbf{q}$

$$(\varphi(\mathbf{k}) - \varphi(\mathbf{k}') + \chi(\varkappa))^2 \sim q^2$$

и сопротивление определяется таким же интегралом, как и в случае закона Блоха. В результате получаем

$$\rho \sim T^5. \tag{10}$$

Заметим, что при игнорировании непрерывности функции $\widetilde{\varphi}$ можно ошибочно получить другой закон ([4]).

5. Существует еще один принципиально выделенный случай: металл с равным числом электронов n_1 и дырок n_2. В этом можно убедиться, если

вычислить ток, соответствующий пробной функции в форме (7) или (9):

$$I_1^\alpha \sim \sum_n \int d\mathbf{p}\, v^\alpha \cdot (\mathbf{p}\cdot\mathbf{u}) \frac{\partial f^{(0)}(\mathbf{p}, n)}{\partial \varepsilon(\mathbf{p}, n)} \sim u^\beta \sum_n \int \frac{dS}{|v|} v^\alpha p^\beta \Big|_{\varepsilon(\mathbf{p},n)=\varepsilon_F} \sim n_1 - n_2.$$

Таким образом, при $n_1 = n_2$ ток обращается в нуль и тогда из (5) следует $\tilde{\rho} = \infty$. Выбрав любую другую пробную функцию, для которой

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}(\mathbf{p}, n)}{\partial \mathbf{p}} \neq \mathrm{const}, \tag{11}$$

получим конечное значение $\tilde{\rho}$; следовательно, в металле устанавливается распределение, удовлетворяющее (11). Но тогда, повторяя рассуждения, проведенные в конце п. 4, получим закон (10). Физически этот интересный результат связан с тем, что при $n_1 = n_2$ дрейф электронов, дырок и фононов не приводит вообще к возникновению электрического тока.

6. До сих пор мы неявно предполагали кубическую симметрию. В общем случае весь анализ остается неизменным, но теперь для каждого диагонального элемента тензора сопротивления $\rho^{\alpha\alpha}$ (в главных осях). При этом для $\tilde{\rho}^{\alpha\alpha}$ сохраняется условие (4), а требование непрерывности и периодичности накладывается на каждую из компонент φ^α, если $\varphi = \varphi\mathbf{u}$. Физически новый результат получается, если открытая поверхность Ферми пересекает только те грани зоны Бриллюена, нормаль к которым не имеет проекции на какую-либо главную ось. Тогда соответствующий диагональный элемент тензора сопротивления будет иметь экспоненциальную зависимость от T. При $n_1 = n_2$ все элементы пропорциональны T^5.

7. Анализ экспериментальных данных по топологии поверхности Ферми (см. обзор ([5])) показывает, что большинство поливалентных металлов имеет либо открытые поверхности, либо равное число электронов и дырок. В рамках существующих экспериментальных данных с определенностью, по-видимому, можно утверждать, что исключение составляют Al, In и, возможно, Tl (для компоненты тензора сопротивления вдоль оси C) и, естественно, щелочные металлы. Фактически только в них можно искать проявление эффекта увлечения. В этой связи интерес приобретает обнаружение закона $\rho \sim T^6$ в K ([6]) и в Na ([7], [8]) при низких температурах, что, по-видимому, можно понять как отражение реально более резкой экспоненциальной зависимости.

Поступило
16 VIII 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956. [2] Дж. Займан, Электроны и фононы, ИЛ, 1962. [3] R. Peierls, Ann. Phys., 4, 121 (1930). [4] E. Pytte, J. Phys. Chem. Sol., 28, 93 (1967). [5] В. Ф. Гайдуков, УФН, 100, 449 (1970). [6] В. С. Цой, В. Ф. Гантмахер, ЖЭТФ, 56, 1934 (1969). [7] D. K. C. Macdonald, G. G. White, S. B. Woods, Proc. Roy. Soc. A, 233, 358 (1956). [8] J. C. Garland, R. Bowers, Phys. kond. mat., 9, 36 (1969).