

01

## Влияние фокусировки на взаимное увлечение электронов и фононов и электросопротивление кристаллов калия

© И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев

Институт физики металлов УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

Поступила в Редакцию 28 марта 2022 г.

В окончательной редакции 15 мая 2022 г.

Принята к публикации 16 мая 2022 г.

Исследовано влияние анизотропии упругой энергии на взаимное увлечение электронов и фононов и электросопротивление кристаллов калия при низких температурах. В гидродинамическом приближении проанализирован обмен импульсом между электронным и тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям колебательного спектра. Учтены актуальные механизмы релаксации импульса фононов: рассеяние на границах образца, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса. Показано, что в предельном случае сильного взаимного увлечения электронов и фононов электросопротивление будет значительно меньше, чем дает теория Блоха–Грюнайзена, а скорости дрейфа фононов и электронов близки и определяются суммарной скоростью релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния. В противоположном случае, когда для фононов доминируют резистивные процессы рассеяния, фононная система остается в равновесии, и электросопротивление следует теории Блоха–Грюнайзена. В этом случае скорости дрейфа всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов.

**Ключевые слова:** электросопротивление, упругая анизотропия, электрон-фононная релаксация.

DOI: 10.21883/FTT.2022.08.52680.324

### 1. Введение

В работе проанализировано влияние упругой анизотропии на электрон-фононную релаксацию, взаимное увлечение электронов и фононов и электросопротивление кристаллов калия. Ранее при исследовании этих эффектов для фононов использовалась модель изотропной среды (см. [1–4]). В этой модели только продольные фононы могут принимать участие в электрон-фононной релаксации. Она использовалась в теории Блоха–Грюнайзена при расчете электросопротивления металлов [5–12]. В работах [13–15] было показано, что это приближение оказалось некорректным для объяснения экспериментальных данных термоэдс увлечения в кристаллах калия [16]. В упруго анизотропных кристаллах распространяются квазипродольные и квазипоперечные фононы (см. [17]). Они имеют отличную от нуля продольную компоненту [17], поэтому в рамках стандартной теории потенциала деформации могут взаимодействовать с электронами. Оказалось, что при низких температурах вклад медленных квазипоперечных мод в термоэдс увлечения кристаллов калия, который ранее не учитывался (см. [1–12]), на порядок величины превышал вклад продольных фононов. Это приближение оказалось недостаточным для объяснения экспериментальных данных [16]. Поэтому в [18] учтено влияние сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию и определена константа электрон-фононного взаимодействия для сдвиговых компонент колебательных мод  $E_{0r} = 0.11$  eV. На необходимость учета влияния сдвиговых деформаций на

энергию электронов проводимости в щелочных металлах указывал Займан в [9,19].

В работе [20] проанализировано влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и электросопротивление кристаллов калия в приближении Блоха–Грюнайзена [6–12]. Учет анизотропии упругой энергии на фононную систему, а также вклада сдвиговых волн в электрон-фононную релаксацию позволили согласовать результаты расчета электросопротивления с данными [21,22] при температурах выше 40 К. Показано, что при температурах, гораздо меньших температуры Дебая ( $T \ll \Theta_D$ ), где сопротивление следовало зависимости  $\rho_{e-ph} \approx B_1 T^5$ , вклад квазипоперечных фононов в электросопротивление, который ранее не учитывался, в 11.5 раза превышал вклад продольных фононов, а релаксация электронов на сдвиговых волнах в 4 раза превышала вклад продольных фононов. Однако при высоких температурах ( $T \gg \Theta_D$ ), где  $\rho_{e-ph} \approx B_2 T$ , вклад продольных фононов оказался в 4.5 раза больше, чем суммарный вклад релаксации электронов на быстрой и медленной поперечных модах.

В теории Блоха–Грюнайзена [5–12] предполагалось, что система фононов находится в равновесии: весь импульс, передаваемый электронами фононам за счет нормальных процессов электрон-фононного рассеяния не передается обратно электронам, а релаксирует внутри подсистемы фононов. В отличие от [19] в настоящей работе мы учли наиболее актуальные процессы релаксации фононов: рассеяние на границах образца, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса, и проана-

лизировали взаимное увлечение электронов и фононов в кристаллах калия с различной концентрацией дислокаций. Для решения этой задачи мы воспользовались гидродинамическим приближением [23–25]: рассмотрели релаксацию и обмен импульсами между электронным и тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям фононного спектра. Гидродинамическое приближение позволяет корректно учесть неупругость электрон-фононной релаксации при расчете электросопротивления (см. [19]). В настоящей работе показано, что в предельном случае сильного взаимного увлечения электронов и фононов электросопротивление будет значительно меньше, чем дает теория Блоха–Грюнайзена, а скорости дрейфа фононов всех поляризаций равны и близки к скорости дрейфа электронов. В противоположном предельном случае, когда для фононов доминируют резистивные процессы рассеяния, и фононная система остается в равновесии, то мы имеем предельный случай теории Блоха–Грюнайзена [7–9,20]. Электросопротивление определяется нормальными процессами электрон-фононной релаксации, а скорости дрейфа всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов.

## 2. Электрон-фононная релаксация в упруго анизотропных металлах

При температурах, гораздо меньших температуры Дебая, основной вклад в релаксацию электронов в металлах будут вносить длинноволновые фононы с волновым вектором  $q \ll q_D$  ( $q_D$  — дебаевский волновой вектор) [26,27]. В связи с этим для фононов мы воспользуемся моделью анизотропного континуума [26,27]. В этой модели спектр фононов  $\omega_q^\lambda = S^\lambda(\theta, \varphi)q$  и фазовая скорость  $S^\lambda(\theta, \varphi)$  для кристаллов калия определены в работах [13,18], а для векторов поляризации, согласно [17], имеем

$$e_j^\lambda = \frac{1}{A_\lambda} \left\{ \frac{h_j}{\psi_j^\lambda} \right\}, \quad A_\lambda = \pm \sqrt{\sum_j \frac{n_j^2}{(\psi_j^\lambda)^2}}, \quad (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}) = \frac{1}{A_\lambda} \sum_j \frac{n_j^2}{\psi_j^\lambda},$$

$$\psi_j^\lambda = \frac{1}{3} + z_\lambda + (k-1)n_j^2, \quad k = (c_{12} + c_{44})/(c_{11} - c_{44}). \quad (1)$$

где  $c_{ij}$  — упругие модули второго порядка,  $\mathbf{n} = \mathbf{q}/q = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$  — единичный волновой вектор фонона,  $z_\lambda$  — корни уравнения Кристоффеля, определяющие спектр и вектора поляризации (см. подробнее [17]). Значения модулей упругости второго порядка при  $T = 4.2$  К взяты из работы [28]. Индекс поляризации  $L$  соответствует продольным фононам, а  $t_1$  и  $t_2$  — соответственно, „быстрой“ и „медленной“ квазипоперечным колебательным модам. Параметры анизотропии  $k-1$  в щелочных кристаллах значительно превышают величины для Si (см. таблицу). Поэтому фокусировка фононов и электрон-фононная релаксация

в кристаллах калия значительно отличается от полупроводниковых кристаллов (см. подробнее [13–15]). Максимальное значение продольной компоненты медленной квазипоперечной моды  $t_2$  достигает 28%, что в два раза больше, чем для кристаллов кремния, а среднее значение  $\langle (\mathbf{e}^{\lambda 2} \mathbf{n})^2 \rangle$ , входящее в константу электрон-фононного взаимодействия, при переходе от кристаллов Si к калию увеличивается в четыре раза (см. таблицу). Увеличение средних значений продольных компонент  $\langle (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n})^2 \rangle$  приводит к значительному возрастанию вклада квазипоперечных мод в электрон-фононную релаксацию. Как уже отмечалось в [9,19], спектр электронов проводимости с энергией Ферми в кристаллах калия становится анизотропным, и они получают возможность взаимодействовать со сдвиговыми волнами (т.е. с поперечной компонентой квазипоперечных мод). Поскольку в упруго анизотропных кристаллах у всех колебательных мод имеются продольные и поперечные компоненты, то вектора поляризации фононов  $\mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q})$  могут быть разложены на продольную  $\mathbf{e}_{\parallel}^\lambda = \mathbf{n}(\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n})$  (обусловленную деформациями сжатия и растяжения) и поперечную компонент  $\mathbf{e}_{\perp}^\lambda = [\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}]$  (обусловленную сдвиговыми деформациями решетки) (см. [29]). В работе [18] показано, что фурье-компонента матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в металлах может быть представлена в виде

$$(C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 \cong (E_{eff}^\lambda)^2 \hbar / (S^\lambda(\theta, \varphi) \rho),$$

$$(E_{eff}^\lambda)^2 = (E_{0L}^2 (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n})^2 + E_{0r}^2 ([\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}]^2)). \quad (2)$$

Кроме константы  $E_{0L} = 1.41$  eV, характеризующей взаимодействие электронов с продольными компонентами, мы ввели константу  $E_{0r}$ , характеризующую взаимодействие электронов с поперечными компонентами колебательных мод. Она определена в работе [18] из сопоставления результатов расчета термоэдс увлечения с данными [23] и оказалась на порядок величины меньше, чем  $E_{0L}$ ;  $E_{0r} = 0.11$  eV. Это не удивительно, так как, согласно оценкам [19], отклонение поверхности Ферми от сферической в кристаллах калия составляет 7%. Такое соотношение констант  $E_{0L}$  и  $E_{0r}$  существенно отличается от полупроводниковых кристаллов, где благодаря значительно большей анизотропии спектра носителей тока константа  $E_{0r}$  на два порядка величины больше, и, как правило, превышает значение  $E_{0L}$  [29,30]. Следует отметить, что в отличие от модели изотропной среды, эффективная константа связи  $(E_{eff}^\lambda(\theta, \varphi))^2$  является функцией углов  $\theta$  и  $\varphi$ , зависимости которой определяются квадратами продольных и поперечных компонент векторов поляризации (см. [18] рис. 2). Для продольных фононов отклонение функции  $(E_{eff}^L(\theta, \varphi))^2$  от изотропного распределения не превышает 10%. Однако для медленной поперечной моды величина она меняется достаточно резко для обоих сечений (см. [18] рис. 2).

Упругие модули второго порядка  $c_{ij}$  ( $10^{12}$  dyne/cm<sup>2</sup>), плотность  $\rho$  (g/cm<sup>3</sup>), параметр анизотропии  $k - 1$  для кристаллов HgSe:Fe и Si, K, Li, Na

Соединение	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{44}$	$\rho$	$k - 1$	$\langle(\mathbf{e}^t \mathbf{n})^2\rangle$	$\langle(\mathbf{e}^{t1} \mathbf{n})^2\rangle$	$\langle(\mathbf{e}^{t2} \mathbf{n})^2\rangle$
HgSe:Fe	0.69	0.51	0.23	8.26	0.61	0.99	$6.7 \cdot 10^{-4}$	$7.0 \cdot 10^{-3}$
Si	1.677	0.65	0.804	2.33	0.67	0.99	$7.5 \cdot 10^{-4}$	$7.9 \cdot 10^{-3}$
K	0.0457	0.0374	0.0263	0.91	2.284	0.965	0.0028	0.0323
Li	0.148	0.125	0.108	0.55	4.825	0.942	0.0044	0.0536
Na	0.0615	0.0469	0.0592	1.01	45.13	0.902	0.0069	0.0908

### 3. Влияние фокусировки на взаимное увлечение электронов и фононов в кристаллах калия

Вычислим поток заряда в металле, обусловленный действием постоянного электрического поля. Исходим из системы кинетических уравнений для неравновесных электронной  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  и фононной  $N^\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{r})$  функций распределения (см. [2–4,13]):

$$\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}) f_{\mathbf{k}} = I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) + I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}^\lambda), \quad (3)$$

$$\mathbf{v}_{\mathbf{q}}^\lambda \nabla_{\mathbf{r}} N_{\mathbf{q}}^\lambda = -(N_{\mathbf{q}}^\lambda - N_{\mathbf{q}}^{(0)\lambda}) \mathbf{v}_{ph}^{(1)\lambda} + I_{phe}(N_{\mathbf{q}}^\lambda, f_{\mathbf{k}}). \quad (4)$$

Здесь  $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \partial \varepsilon_{\mathbf{k}} / \hbar \partial \mathbf{k}$ ,  $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}^\lambda = \partial \omega_{\mathbf{q}}^\lambda / \partial \mathbf{q}$  — групповые скорости электронов и фононов с поляризацией  $\lambda$ ,  $N_{\mathbf{q}}^{(0)\lambda}$  — функция Планка, полная скорость релаксации фононов  $\mathbf{v}_{ph}^{(1)\lambda} = \mathbf{v}_{phB}^\lambda(\theta, \varphi) + \mathbf{v}_{phd}^\lambda + \mathbf{v}_{phU}^\lambda(\mathbf{q})$  включает все неэлектронные резистивные скорости релаксации, обусловленные рассеянием фононов на границах образца  $\mathbf{v}_{phB}^\lambda(\theta, \varphi)$ , дислокациях  $\mathbf{v}_{phd}^\lambda$  и в процессах фонон-фононного переброса  $\mathbf{v}_{phU}^\lambda(\mathbf{q})$ . Интегралы столкновений электронов с примесями  $I_{ei}$ , фононами  $I_{eph}$  и фононов с электронами  $I_{phe}$  определены в [2,14].

$$I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}^\lambda) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |C_{\mathbf{q}}^\lambda|^2 \left\{ \left[ f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{q}})(N_{\mathbf{q}}^\lambda + 1) - f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})N_{\mathbf{q}}^\lambda \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}^\lambda) - \left[ f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \times (N_{\mathbf{q}}^\lambda + 1) - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{k}})N_{\mathbf{q}}^\lambda \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}^\lambda) \right\}, \quad (5)$$

$$I_{phe} = \frac{4\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} |C_{\mathbf{q}}^\lambda|^2 \left[ f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{k}})(N_{\mathbf{q}}^\lambda + 1) - f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})N_{\mathbf{q}}^\lambda \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}^\lambda), \quad (6)$$

где  $|C_{\mathbf{q}}^\lambda|^2 = (C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 q \cong (E_{eff}^\lambda)^2 \hbar / (S^\lambda(\theta, \varphi) \rho) q$ , а  $E_{eff}^\lambda$  определяется выражениями (2). Спектр электронов проводимости в кристаллах калия предполагается изотропным, а для фононов используется модель анизотропного континуума [13–15,20].

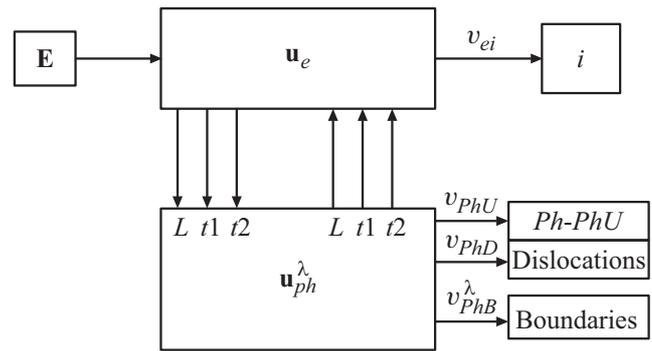


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая релаксацию импульса, полученного электронами от электрического поля в неравновесной электрон-фононной системе.

Схема, описывающая релаксацию импульса квазичастиц в неравновесной электрон-фононной системе приведена на рис. 1. Неравновесный импульс электронов, полученный от электрического поля, релаксирует на примесях и дефектах, а в нормальных процессах электрон-фононного рассеяния часть этого импульса передается фононам и обеспечивает дрейфовое движение фононов. Если весь импульс, переданный фононам полностью релаксирует в резистивных процессах рассеяния фононов: при рассеянии на границах образца, дефектах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса, то система фононов остается в равновесии, как это предполагается в теории Блоха–Грюнайзена [5–8]. В этом случае нормальные процессы электрон-фононного рассеяния обеспечивают релаксацию электронной системы к дрейфовому локально равновесному состоянию и, соответственно, вместе с примесями и дефектами при  $T \gg \Theta_D$  обуславливают линейную по температуре зависимость электросопротивления металла. Поскольку в совершенных кристаллах калия при достаточно низких температурах процессы фонон-фононного переброса выморожены, то только малая часть неравновесного импульса, полученного фононами, релаксирует на примесях, дефектах и дислокациях, а большая часть возвращается обратно в электронную подсистему. В отличии от теории Блоха–Грюнайзена мы учли влияние анизотропии упругой энергии на релаксацию фононов

и проанализировали вклады всех колебательных мод в электросопротивление кристаллов калия. Как показано в [13–15,20], основную роль в этой релаксации играют медленные квазипоперечные фононы. Ограничимся линейным приближением по внешним возмущениям и представим функции распределения электронов и фононов в виде [1–4]:

$$f_{\mathbf{k}} = f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad N_{\mathbf{q}}^{\lambda} = N_{q\lambda}^0 + g_{\lambda}(\mathbf{q}), \quad (7)$$

где  $f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$  и  $N_{q\lambda}^0$  — равновесные функции распределения для электронов и для фононов, а  $\delta f_{\mathbf{k}}$  и  $g_{\lambda}(\mathbf{q})$  — неравновесные добавки к ним. Линеаризуем интегралы столкновений (3), (4) по этим добавкам. Рассмотрим баланс импульса в системе электронов, взаимодействующих с примесями и фононами в изотермических условиях. Электрическое поле считается достаточно слабым, чтобы можно было ограничиться линейным приближением. Предполагаем, что для подсистем электронов и фононов реализуется дрейфовое-локально равновесное состояние, которое можно описать в гидродинамическом приближении [23–25]:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{u}) = \left( \exp\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \xi - \hbar \mathbf{k} \mathbf{u}_e}{k_B T}\right) + 1 \right)^{-1} \\ = f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad \delta f_{\mathbf{k}} = (\hbar \mathbf{k} \mathbf{u}_e) \left( \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right). \quad (8)$$

$$N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_{\lambda}) = N_{q\lambda}^0 + g_{\lambda}(\mathbf{q}), \quad g_{\lambda}(\mathbf{q}) \left\{ \frac{\hbar \mathbf{q} \mathbf{u}_{\lambda}}{k_B T_0} \right\} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1). \quad (9)$$

Здесь  $f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$  и  $N_{q\lambda}^0$  — функции Ферми и Планка,  $\mathbf{u}_e$  и  $\mathbf{u}_{\lambda}$  — дрейфовые скорости электронов и фононов, которые определяются из связанной системы уравнений баланса импульса квазичастиц в неравновесной электрон-фононной системе. Итак, при гидродинамическом описании электронного переноса в упруго анизотропных металлах электронный поток взаимодействует с тремя фононными, соответствующим трем ветвям фононного спектра. Для получения уравнений баланса умножим уравнения (5) и (6) на  $\hbar \mathbf{k}$  и  $\hbar \mathbf{q}$  и просуммируем, соответственно, по импульсам электронов и фононов

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hbar \mathbf{k} \left\{ I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0) + I_{eph}(f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}), g_{\lambda}(\mathbf{q})) \right\} \\ = m_F n_e \sum_{\lambda} \left\{ \mathbf{u}_e^{\alpha} v_{eph(\delta f)}^{\lambda}(k_F) - \mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha} v_{eph(g)}^{\lambda(B)}(k_F) \right\}. \quad (10)$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \mathbf{q}^{\alpha} \left\{ I_{phe}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0) + I_{phe}^{\lambda}(f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}), g_{\lambda}(\mathbf{q})) \right\} \\ = m_F n_e \left\{ \mathbf{u}_e^{\alpha} v_{phe(\delta f)}^{\lambda}(k_F) - \mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha} v_{phe(g)}^{\lambda(B)}(k_F) \right\}. \quad (11)$$

Первые члены в выражениях (10) и (11) учитывают передачу импульса от неравновесных электронов к фононам, а вторые — от неравновесных фононов к электронам. Отметим, что скорости релаксации в электрон-фононных и фонон-электронных процессах рассеяния

равны:  $v_{eph(\delta f)}^{\lambda}(k_F) = v_{phe(\delta F)}^{\lambda}(k_F)$ ,  $v_{eph(g)}^{\lambda(B)} = v_{phe(g)}^{\lambda(B)}$ . Они могут быть представлены в виде

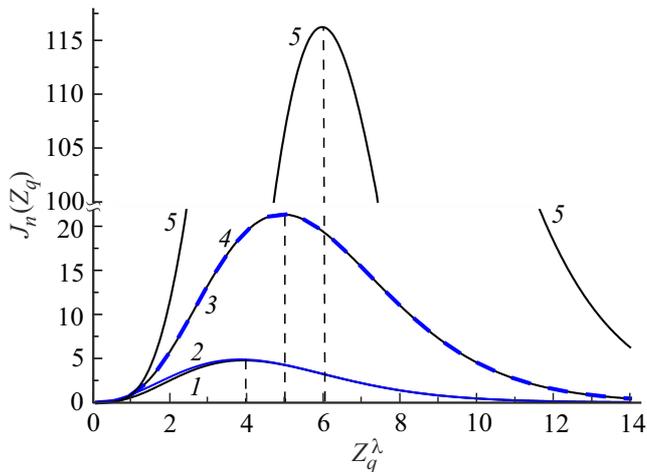
$$v_{eph(\delta f)}^{\lambda}(k_F) = v_{phe(\delta f)}^{\lambda}(k_F) = \frac{m_F}{24\pi^4 \hbar^3 n_e} \int d\Omega |C_0^{\lambda}|^2 (q_{T\lambda})^5 \\ \times \int dZ_q^{\lambda} (Z_q^{\lambda})^4 N_{q\lambda}^0 \int dy_{\mathbf{k}} \left[ (f_0(y_{\mathbf{k}})) (1 - f_0(y_{\mathbf{k}} + Z_q^{\lambda})) \right] \\ = \frac{m_F}{24\pi^4 \hbar^3 n_e \rho} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^5 \Phi_{\Omega}^{\lambda} \cdot J_{eph(\delta f)}(Z_D^{\lambda}), \\ \Phi_{\Omega}^{\lambda} = \left\langle \frac{(E_{eff}^{\lambda})^2}{[S^{\lambda}(\theta, \varphi)]^5} \right\rangle = \int_0^{\pi} \sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{(E_{eff}^{\lambda})^2}{[S^{\lambda}(\theta, \varphi)]^5}, \quad (12) \\ q_T^{\lambda} = (k_B T) / (\hbar S^{\lambda}(\theta, \varphi)),$$

$$J_{eph(\delta f)}^{\lambda} = J_{phe(\delta f)}(Z_D^{\lambda}) = \int_0^{Z_D^{\lambda}} dZ_q^{\lambda} (Z_q^{\lambda})^4 N_{q\lambda}^0 \\ \times \int dy_{\mathbf{k}} \left[ (f_0(y_{\mathbf{k}})) (1 - f_0(y_{\mathbf{k}} + Z_q^{\lambda})) \right] \\ v_{eph(g)}^{\lambda(B)} = v_{phe(g)}^{\lambda(B)} = \frac{m_F}{24n_e \pi^4 \hbar^3} \int d\Omega_q (q_T^{\lambda})^5 |C_0^{\lambda}| \\ \times \int_0^{Z_D^{\lambda}} dZ_q^{\lambda} Z_q^{\lambda^4} \left\{ N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \int dy_{\mathbf{k}} [f_0(y_{\mathbf{k}}) - f_0(y_{\mathbf{k}} + Z_q^{\lambda})] \right\} \\ = \frac{m_F}{24n_e \pi^4 \hbar^3} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^5 \Phi_{\Omega}^{\lambda} \cdot J_{phe(g)}(Z_D^{\lambda}), \\ J_{phe(g)}(Z_D^{\lambda}) = \int_0^{Z_D^{\lambda}} dZ_q^{\lambda} Z_q^{\lambda^4} \\ \times \left\{ N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \int dy_{\mathbf{k}} [f_0(y_{\mathbf{k}}) - f_0(y_{\mathbf{k}} + Z_q^{\lambda})] \right\} \quad (13)$$

Гидродинамическое приближение позволяет нам ввести функции распределения наиболее эффективных фононов для в электрон-фононных и фонон-электронных процессах рассеяния:

$$\Phi_{eph(\delta f)}(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_{q\lambda}^0 \int dy_{\mathbf{k}} \left[ (f_0(y_{\mathbf{k}})) (1 - f_0(y_{\mathbf{k}} + Z_q^{\lambda})) \right], \\ \Phi_{phe(g)}(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \\ \times \int dy_{\mathbf{k}} [f_0(y_{\mathbf{k}}) - f_0(y_{\mathbf{k}} + Z_q^{\lambda})]. \quad (14)$$

Не трудно убедиться из формул (14), что функции наиболее эффективных для электрон-фононных  $\Phi_{eph(\delta f)}(Z_q^{\lambda})$  и фонон-электронных  $\Phi_{phe(g)}(Z_q^{\lambda})$  процессов рассеяния совпадают. Поэтому скорости релаксации импульса в электрон-фононных и фонон-электронных процессах



**Рис. 2.** Функции распределения наиболее эффективных фононов от параметра  $Z_q^\lambda$ : кривая 1 —  $\Phi_{eph(el)}(Z_q^\lambda) = (Z_q^\lambda)^{4N_q^\lambda}$  для упругого рассеяния электронов, кривая 2 —  $\Phi_4(Z_q^\lambda) = (Z_q^\lambda)^4 N_q^\lambda (N_q^\lambda + 1)$  (для теплоемкости), кривая 3 —  $\Phi_{eph(\delta f)}(Z_q^\lambda)$  для неупругого рассеяния электронов, пунктирная кривая 4 —  $\Phi_5(Z_q^\lambda) = (Z_q^\lambda)^5 N_q^\lambda (N_q^\lambda + 1)$  определяет распределение фононов при решении задачи вариационным методом [8-12], кривая 5 — для  $\Phi_6(Z_q^\lambda) = (Z_q^\lambda)^6 N_q^\lambda (N_q^\lambda + 1)$  фонон-фононных процессов переброса.

рассеяния оказывается равными:  $v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) = v_{phe(g)}^{\lambda(B)}$ . При этом интегральные части уравнений баланса (10) и (11) будут равны и пропорциональны разности дрейфовых скоростей электронов и фононов:

$$m_F n_t \sum_{\lambda} v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) \left\{ \mathbf{u}_e^\alpha - \mathbf{u}_\lambda^\alpha \right\}. \quad (15)$$

Таким образом, если скорости дрейфа электронов и фононов совпадают, то электрон-фононное взаимодействие не вносит вклад релаксацию импульса электронов и фононов.

Рассмотрим роль неупругости электрон-фононной релаксации в металлах. В монографиях [24,25] полагалось, что неупругостью электрон-фононного рассеяния в металлах можно пренебречь, поскольку энергия Ферми гораздо больше энергии фонона  $\hbar\omega_q^\lambda$  и  $k_B T$ . В монографиях Займана [14,16] утверждалось, что, поскольку энергия падающего и рассеянного фонона лежат в пределах теплового размытия энергии Ферми, то они отличаются на величину порядка  $k_B T$ , которая гораздо меньше  $\varepsilon_F$ , поэтому можно пренебречь их различием. Естественно, что энергии Ферми  $\varepsilon_F$  в металлах при гелиевых температурах на 4–5 порядок больше энергии термически возбужденных фононов  $\hbar\omega_q^\lambda$  и  $k_B T$ , однако эти соображения не имеют отношения к критерию учета или пренебрежения неупругостью электрон-фононного рассеяния. Дело в том, что в интегралы электрон-фононных столкновений входят функции Ферми  $f_0(\varepsilon_k \pm \hbar\omega_q^\lambda)$ . Параметр неупругости  $Z_q^\lambda = \hbar\omega_q^\lambda / k_B T$  должен сравниваться не с отношением

$|\varepsilon_F / (k_B T)|$ , а с величиной  $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F) / (k_B T)$ . Для электронов на уровне Ферми  $y_k = 0$ , а в пределах теплового размытия уровня Ферми  $|k_k| \leq 1$ . Релаксация импульса электронов обеспечивается всеми термически активированными фононами, а их распределение определяется функциями распределения наиболее эффективных для электрон-фононной релаксации  $\Phi_{eph(\delta f)}(Z_q^\lambda) = \Phi_{phe(g)}(Z_q^\lambda)$  (см. (14)). Как видно из рис. 2, эта функция (кривая 1) достигает максимума при  $Z_q^\lambda = 5$  и быстро убывает при  $Z_q^\lambda > 12$  за счет функции распределения Планка. Следует отметить, что она практически совпадает со штриховой кривой 4, которая определяет выражение для функции распределения наиболее эффективных фононов  $\Phi_5(Z_q^\lambda)$  при решении задачи вариационным методом (см. [5–10], а также рис. 2, кривые 3, 4). Пренебрегая неупругостью электрон-фононного рассеяния  $Z_q^\lambda \rightarrow 0$ , мы получаем  $\Phi_{eph(el)}(Z_q^\lambda)^4 N_q^\lambda$  (см. рис. 2, кривая 2). Расчет интегралов по  $Z_q^\lambda$  при низких температурах дает  $J_{eph(\delta f)}^\lambda = 124.4$ , а в упругом приближении  $J_{eph(el)}^\lambda = 24.9$ . Таким образом, учет неупругости электрон-фононного рассеяния приводит к увеличению электросопротивления в 5 раз, по сравнению упругим приближением. Следует отметить, что для теплоемкости функция распределения термически активированных фононов, согласно [14–16], определяется выражением  $\Phi_{tepl}(Z_q^\lambda) = (Z_q^\lambda)^4 N_q^\lambda (N_q^\lambda + 1)$ . Она достигает максимума при  $Z_q^\lambda = 4$  и отлична от нуля в интервале  $1 < Z_q^\lambda < 9$  (см. рис. 2, кривая 2). Итак, при низких температурах наиболее актуальные для электросопротивления фононы распределены в интервале  $1 < Z_q^\lambda < 12$  с максимумом при  $Z_q^\lambda \approx 5$ . Для них неравенство  $Z_q^\lambda \ll 1$  не выполняется. Более того, для актуальных фононов в области теплового размытия уровня Ферми  $|y_k| \leq 1$  выполняется противоположное неравенство:  $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F) / (k_B T) \ll Z_q^\lambda$ . Поэтому основной вклад в электросопротивление при низких температурах вносят не „вертикальные“ переходы  $\hbar\omega_q^\lambda \approx k_B T$  или „горизонтальные“  $\hbar\omega_q^\lambda \gg k_B T$  переходы по терминологии Займана [14,16], а „косые“ переходы, для которых  $k_B T \leq \hbar\omega_q^\lambda \leq 12k_B T$  (см. рис. 3). Итак, гидродинамическое приближение позволяет корректно учесть неупругость электрон-фононного рассеяния в металлах.

Для рассеяния электронов на примесях имеем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hbar \mathbf{k} I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hbar \mathbf{k} (\hbar \mathbf{k} \mathbf{u}) v_{ei}(k) \left( \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k} \right) \\ &= -\mathbf{u}^\alpha m_F n_e \cdot v_{ei}(k_F). \end{aligned} \quad (16)$$

Из уравнений (7) и (8) для полных уравнений баланса импульса в изотермических условиях  $\nabla_\alpha T(r) = 0$  получим систему четырех алгебраических уравнений для

скоростей дрейфа:

$$e\mathbf{E}_\alpha n_e = m_F n_e \left[ v_{ei}(k_F) \mathbf{u}_e^\alpha + \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) \{ \mathbf{u}_e^\alpha - \mathbf{u}_\lambda^\alpha \} \right] - \mathbf{u}_\lambda^\alpha R_\lambda + m_F n_e (\mathbf{u}_e^\alpha - \mathbf{u}_\lambda^\alpha) v_{phe(\delta f)}^\lambda(k_F) = 0. \quad (17)$$

Из (17) выразим скорость дрейфа фононов через дрейфовую скорость электронов:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_\lambda^\alpha &= \mathbf{u}_e^\alpha \frac{m_F n_e^\alpha v_{phe(\delta f)}^{\lambda(2)}(k_F)}{\{ R_\lambda + m_F n_e v_{phe(g)}^{\lambda(B)}(k_F) \}} \\ &= \mathbf{u}_e^\alpha \frac{1}{\{ 1 + R_\lambda / m_F n_e v_{phe(g)}^{\lambda(B)}(k_F) \}}. \end{aligned} \quad (18)$$

Как и должно быть: направление потока электронов совпадает с направлением потока фононов и противоположно направлению электрического тока. Очевидно, что при выполнении неравенства  $[R_\lambda / (m_F n_e v_{phe(g)}^{\lambda(B)})] \ll 1$  скорость дрейфа моды  $\lambda$  будет близка к скорости дрейфа электронов  $\mathbf{u}_\lambda^\alpha \cong \mathbf{u}_e^\alpha$ . Величина  $R_\lambda$  включает все неэлектронные механизмы релаксации импульса фононов: рассеяние на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса:

$$\begin{aligned} R_\lambda &= \frac{(k_B T)^4}{3(2\pi\hbar)^3} J_5(Z_q^\lambda) \left\langle \frac{v_{phB}^\lambda(\theta, \varphi)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^5} \right\rangle \\ &+ \frac{v_{phd}^*(k_B T)^5}{\hbar^3(2\pi\hbar)^3} J_5(Z_q^\lambda) \left\langle \frac{1}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^5} \right\rangle \\ &+ \frac{(k_B T)^7}{\hbar^3(2\pi)^3} A_U^\lambda \cdot \exp\left(-\frac{C_U^\lambda}{T}\right) \cdot J_6^2(Z_D^\lambda) \left\langle \frac{1}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^5} \right\rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

Скорости релаксации фононов  $v_{phB}^\lambda(\theta, \varphi)$  при диффузном рассеянии на границах образцов с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями определены в [17], величина  $v_{phd}^*$  — в работах [24]. Для процессов переброса коэффициент  $C_U^\lambda$  определяется температурой Дебая для каждой моды:  $C_U^\lambda \cong T_D^\lambda / \delta_\lambda$ , где подгочный параметр  $\delta_\lambda \approx 2-3$ , для оценки коэффициента  $A_U^\lambda$  мы пользуемся способом [17,31].

#### 4. Фокусировка фононов и электросопротивление кристаллов калия

Из системы уравнений (17) найдем скорости дрейфа электронов и фононов:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_e^\alpha &= \frac{e\mathbf{E}_\alpha m_F}{\tilde{v}_{eR}(k_F)}, \\ \tilde{v}_{eR}(k_F) &= \left\{ v_{ei}(k_F) + \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) \left[ 1 - \frac{1}{1 + K_U^\lambda} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_\lambda^\alpha &= \frac{e\mathbf{E}_\alpha m_F}{\tilde{v}_{eR}(k_F)} \frac{m_F n_e^\alpha v_{phe(\delta f)}^{\lambda(2)}(k_F)}{\{ R_\lambda + m_F n_e v_{phe(g)}^{\lambda(B)}(k_f) \}} \\ &= \frac{e\mathbf{E}_\alpha m_F}{\tilde{v}_{eR}(k_F)} \frac{1}{\{ 1 + K_U^\lambda \}}, \\ K_U^\lambda &= [R_\lambda / (m_F n_e v_{phe(g)}^{\lambda(B)})]. \end{aligned} \quad (21)$$

Вычислим ток проводимости и определим электросопротивление кристаллов калия:

$$\begin{aligned} J &= -|e| \mathbf{u}_e^\alpha n_e = -\frac{e^2 n_e}{\tilde{v}_{eR}(k_F) \cdot m_F} \mathbf{E}_\alpha, \\ \rho_{xx} &= \frac{\tilde{v}_{eR}(k_F) \cdot m_F}{e^2 n_e} \\ &= \left( \frac{m_F}{e^2 n_e} \right) \left[ \sum_\lambda \frac{v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) K_U^\lambda}{1 + K_U^\lambda} \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

Как видно из (22), весь эффект от частичной передачи неравновесного импульса от фононов к электронам определяется коэффициентом  $K_U^\lambda$  и сводится к перенормировке эффективной скорости релаксации электронов на фононах за счет резистивных механизмов релаксации фононов. Рассеяние на примесях обеспечивает выход электросопротивления на постоянное значение. Мы не будем рассматривать этот эффект, а проанализируем влияние релаксации фононов в резистивных процессах на обмен импульсом внутри электрон-фононной системы и электросопротивление кристаллов калия. Очевидно, что в случае слабого рассеяния фононов в неэлектронных механизмах релаксации  $K_U^\lambda \ll 1$  электросопротивление кристаллов калия будет значительно меньше, чем дает теория Блоха–Грюнайзена:

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &\cong \left( \frac{m_F}{e^2 n_e} \right) \left[ \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) K_U^\lambda \right] \ll \rho_{xx}^{BG} \\ &= \left( \frac{m_F}{e^2 n_e} \right) \left[ \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

В этом пределе доминируют нормальные процессы электрон-фононной релаксации как для электронов, так и для фононов. При этом большая часть импульса неравновесных электронов, переданная фононам, возвращается обратно в электронную систему. В итоге мы получаем довольно любопытный результат: в условиях сильного взаимного увлечения электронов и фононов электросопротивление уже не зависит от электрон-фононной релаксации, а будет полностью определяться резистивными механизмами релаксации фононов: рассеянием на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса:

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &\cong \left( \frac{m_F}{e^2 n_e} \right) \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^\lambda(k_F) \left[ R_\lambda / (m_F n_e v_{phe(g)}^{\lambda(B)}) \right] \\ &= \left( \frac{1}{e^2} \right) \left[ \sum_\lambda R_\lambda \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

В этом скорости дрейфа фононов всех поляризаций равны и совпадают со скоростью дрейфа электронов. Они определяются скоростью релаксации импульса фононов в резистивных процессах рассеяния:

$$u_e^\alpha \approx u_\lambda^\alpha \approx \frac{eE_\alpha m_F}{\tilde{v}_{eR}(k_F)} \approx eE_\alpha m_F / \sum_\lambda R_\lambda. \quad (25)$$

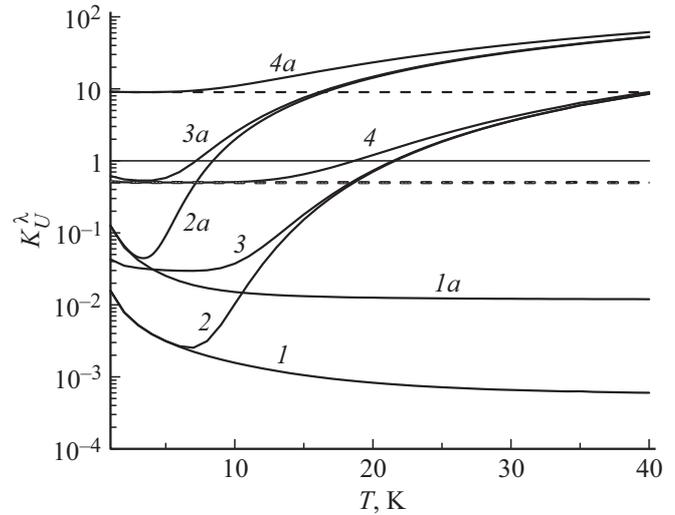
В противоположном предельном случае  $K_U^\lambda \gg 1$  большая часть дрейфового импульса, полученного от электронов, релаксирует в резистивных процессах рассеяния внутри фоновой системы. Этот случай реализуется при повышении температуры, когда доминируют процессы фоновой системы. Фоновая система остается в равновесии, и мы переходим к приближению Блоха–Грюнайзена [5–8]:

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &\cong \left( \frac{m_F}{e^2 n_e} \right) \left[ \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^{(\lambda)}(k_F) \left( 1 - (K_U^\lambda)^{-1} \right) \right] \\ &\approx \left( \frac{m_F}{e^2 n_e} \right) \left[ \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^{(\lambda)}(k_F) \right] = \rho_{xx}^{BG}. \end{aligned} \quad (26)$$

В этом случае скорости дрейфа всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов:

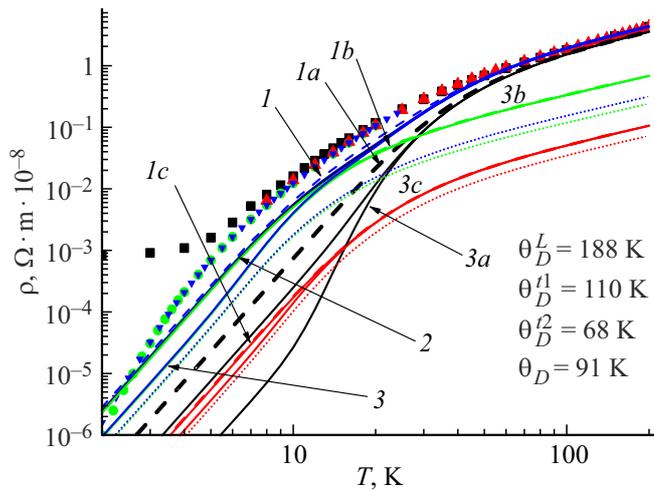
$$\begin{aligned} \mathbf{u}_e^\alpha &= \frac{e\mathbf{E}_\alpha m_F}{\tilde{v}_{eR}(k_F)} \cong \frac{e\mathbf{E}_\alpha m_F}{\sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^{(\lambda)}(k_F)}, \\ \mathbf{u}_\lambda^\alpha &= \frac{e\mathbf{E}_\alpha m_F}{\tilde{v}_{eR}(k_F)} \frac{1}{\{1 + K_U^\lambda\}} \approx \frac{e\mathbf{E}_\alpha m_F}{K_U^\lambda \sum_\lambda v_{eph(\delta f)}^{(\lambda)}(k_F)}, \\ u_e^\alpha / K_U^\lambda &\ll u_e^\alpha. \end{aligned} \quad (28)$$

Проанализируем температурные зависимости коэффициента перенормировки эффективной скорости релаксации электронов на фононах  $K_U^\lambda$ . Как видно из рисунка 3, рассеяние фононов на границах образца не может обеспечить равновесие фоновой системы: только малая часть неравновесного импульса, полученного фононами, релаксирует на границах, а большая часть возвращается обратно в электронную подсистему. Для кристаллов калия без дислокаций предельный случай  $K_U^\lambda \ll 1$  реализуется для медленной  $t_2$ -моды в интервале температур  $1 \text{ К} < T < 5 \text{ К}$ , для  $L$ -фононов в интервале  $1 \text{ К} < T < 15 \text{ К}$  (см. рис. 3, кривые 2, 2a). Поскольку при низких температурах в электросопротивлении доминирует медленная  $t_2$ -мода, то для кристаллов калия предельный случай сильного взаимного увлечения может быть реализован только в интервале  $1 \text{ К} < T < 5 \text{ К}$ . Как видно из рисунка 3, медленные  $t_2$ -фононы значительно сильнее рассеиваются на дислокациях, чем  $L$ -фононы. Для кристаллов калия с минимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.03$  при  $T < 15 \text{ К}$  коэффициент  $K_U^L$  гораздо меньше единицы (см. рис. 3, кривые 3). Поэтому для  $L$ -фононов может быть реализован случай сильного взаимного увлечения. В принятой нами модели мы



**Рис. 3.** Температурные зависимости коэффициента  $K_U^\lambda = [R_\lambda / (m_F n_e v_{ph-g}^{\lambda(B)})]$  в кристаллах калия для продольных (кривые 1, 2, 3, 4) и медленных  $t_2$ -фононов (кривые 1a, 2a, 3a, 4a). Кривые 1, 1a — для граничного рассеяния, кривые 2, 2a — для граничного рассеяния и процессов переброса, кривые 3, 3a — для рассеяния на границах, дислокациях с минимальной концентрацией  $N_d = 0.03$  и в процессах переброса, кривые 4, 4a — для рассеяния на границах, дислокациях с максимальной концентрацией  $N_d = 0.55$  и в процессах переброса.

рассчитали температурные зависимости электросопротивления кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций и сравнили результаты расчета с экспериментальными данными (см. рис. 4, кривые 1, 2, 3). Значения концентраций взяты из работ [16,20], в которых измерялась термоэдс, но не электросопротивление. Как видно из рисунка, для кристаллов калия с максимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.55$  температурные зависимости электросопротивления близки к рассчитанным в приближении Блоха–Грюнайзена. Для нее доминируют резистивные процессы рассеяния фононов: при низких температурах за счет дислокаций, а при высоких — за счет процессов переброса (см. рис. 3, кривые 4, 4a). Для  $t_2$ -моды коэффициент  $K_U^{t_2} \gg 1$ . Практически весь импульс, поступающий от электронов в  $t_2$ -моду, при низких температурах релаксирует на дислокациях, а при высоких — в процессах переброса. Для этих кристаллов соотношение вкладов в электросопротивление имеет вид:  $\rho_{e-ph}^{t_2} : \rho_{e-ph}^L : \rho_{e-ph}^{t_1} = 0.94 : 0.035 : 0.025$ . Для них доминируют резистивные процессы рассеяния фононов: при низких температурах за счет дислокаций, а при высоких — за счет процессов переброса (см. рис. 3, кривые 4a). Для этой моды коэффициент  $K_U^{t_2} \gg 1$ . Поэтому  $t_2$ -мода находится в равновесии, и для нее реализуется режим Блоха–Грюнайзена. Для кристаллов калия с минимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.03$  (с деформацией  $\varepsilon = 0.027$ ) вклад медленной  $t_2$ -моды в электросопротивление возрастает



**Рис. 4.** Температурные зависимости электросопротивления кристаллов калия: кривые 1, 1a, 1b, 1c — результаты для теории Блоха–Грюнайзена; кривые 2, 2a, 2b, 2c — для кристаллов с максимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.55$ ; кривые 3, 3a, 3b, 3c — для кристаллов с минимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.03$ ; кривые 1a, 2a, 3a — вклады  $L$ -фононов, кривые 1b, 2b, 3b — вклады медленных поперечных, кривые 1c, 2c, 3c — вклады быстрых квазипоперечных фононов. Символы — экспериментальные данные из работ [21,22,34,35].

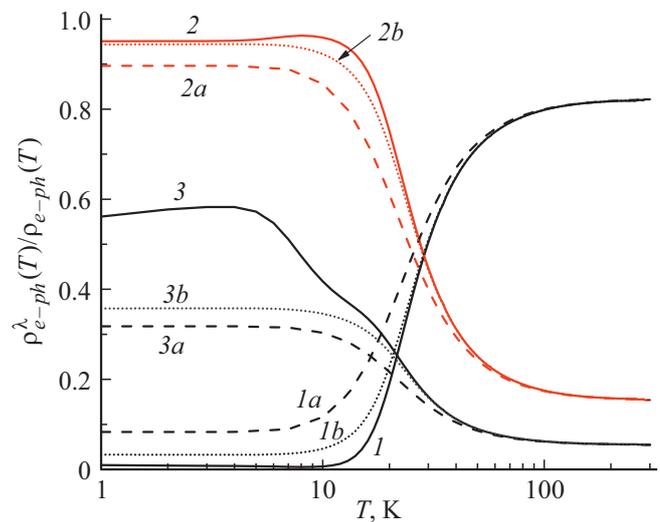
до 95%, а соотношение вкладов имеет вид:  $\rho_{e-ph}^{t2} : \rho_{e-ph}^L : \rho_{e-ph}^{t1} = 0.95 : 0.01 : 0.04$ . При этом вклад сдвиговой компоненты  $t_2$ -моды возрастает от 32% в модели Блоха–Грюнайзена до 56%. Для этих кристаллов  $K_u^L \approx 0.5$ , и скорость релаксации  $L$ -фононов в неэлектронных механизмах рассеяния сравнима со скоростью релаксации на электронах. В связи с этим эффект взаимного увлечения слабо выражен. Он оказывает незначительное влияние на полное электросопротивление (см. рис. 4, кривые 1, 2).

Однако с повышением температуры вклад  $L$ -фононов в электросопротивление быстро возрастает и при  $T > 30$  К становится больше вклада медленной  $t_2$ -моды. При этом коэффициент становится гораздо больше единицы при  $T > 40$  К (см. рис. 3 и 5). Следует отметить, что с повышением температуры главную роль начинают играть процессы фонон-фононного переброса, и при  $T > 40$  К результаты расчета электросопротивления кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций хорошо согласуются и с теорией Блоха–Грюнайзена и с результатами измерений для чистых образцов [21,22,32,33]. В модели Блоха–Грюнайзена было показано, что при низких температурах  $T < 10$  К вклад медленной  $t_2$ -моды в электросопротивление оказался на порядок величины больше, чем вклад продольных фононов, соотношение вкладов имеет вид:  $\rho_{e-ph}^{t2} : \rho_{e-ph}^L : \rho_{e-ph}^{t1} = 0.9 : 0.08 : 0.02$  (см. [20]). Доминирующая роль медленной поперечной моды в электросопротивлении кристаллов калия при низких температурах обусловлена

тем, что она имеет минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированной энергии фонона (см. [20], рис. 1) и в связи с этим она вносит максимальный вклад в электросопротивление. Как видно из формулы (12), отношение коэффициентов  $\Phi_{\Omega}^{\lambda}(T)$  для медленной  $t_2$ -моды и  $L$ -фононов имеет вид:

$$\Phi_{\Omega}^{t2} / \Phi_{\Omega}^L = \left\langle (E_{eff}^{t2}(\theta, \varphi))^2 \right\rangle / \{S^{t2}(\theta, \varphi)\}^6 / \left\langle (E_{eff}^L(\theta, \varphi))^2 \right\rangle / \{S^L(\theta, \varphi)\}^6. \quad (29)$$

Квадрат эффективной константы связи продольных фононов с электронами  $(E_{eff}^L)^2$  в 25 раз больше, чем для медленной поперечной моды. Однако в направлениях типа [110] фазовая скорость  $t_2$ -моды в 4 раза меньше, чем для продольных фононов, а отношение усредненных значений дает  $\langle S^L \rangle / \langle S^{t2} \rangle = 2.54$ . Шестая степень этого отношения дает величину на два порядка большую. В результате вычисления угловых средних в формуле (29) имеем:  $\Phi_{\Omega}^{t2} / \Phi_{\Omega}^L \approx 11.5$ . Для термически возбужденных фононов с одной и той же энергией волновой вектор  $t_2$ -моды в 2.5 раза больше, чем для продольных фононов, поэтому их вклад в релаксацию электронного импульса на порядок величины превышает вклад продольных фононов. Следует отметить значительную роль релаксации электронов на сдвиговой компоненте  $t_2$ -моды, которая обеспечивает 32% электросопротивления кристаллов калия и в 4 раза превышает вклад продольных фононов. Однако с повышением температуры вклад продольных



**Рис. 5.** Температурные зависимости относительных вкладов в электросопротивление кристаллов калия  $\rho_{e-ph}^{\lambda}(T) / \rho_{e-ph}(T)$  для медленных квазипоперечных фононов — кривые 2, 2a, 2b, для  $L$ -фононов — 1, 1a, 1b, для сдвиговой компоненты  $t_2$ -моды — кривые 3, 3a, 3b; для кристаллов с минимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.03$  — кривые 1, 2, 3, для кристаллов с максимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.55$  — кривые 1b, 2b, 3b, расчет согласно теории Блоха–Грюнайзена — кривые 1a, 2a, 3a.

фононов возрастает значительно быстрее, чем вклад медленной  $t_2$ -моды и при температуре выше 30 К он уже преобладает (см. рис. 5). С дальнейшим повышением температуры при  $T \geq T_D^L$  вклад продольных фононов доминирует и при комнатной температуре он достигает 82%, тогда как вклад медленной  $t_2$ -моды уменьшается до 15%, а вклад быстрой поперечной моды составляет всего 3% (см. рис. 5).

Из сравнения результатов расчета с данными эксперимента [21,22,32,33] видно, что при температурах выше 40 К они хорошо согласуются (см. рис. 4). Это объясняется тем, что весь импульс получаемый фононами в нормальных процессах электрон-фононного рассеяния релаксирует внутри фононной системы главным образом за счет процессов фонон-фононного переброса. Эти процессы активируются при температурах порядка  $\theta_D^L/\gamma$ , где  $\gamma \sim (2-3)$ . Этот результат свидетельствует, что учет влияния анизотропии упругой энергии на фононную систему, а также вклада сдвиговых волн в электрон-фононную релаксацию позволяют согласовать результаты расчета электросопротивления с данными [21,22,32,33] без использования подгоночных параметров. Однако с понижением температуры ниже 40 К расхождение данных эксперимента [21,22,32,33] с результатами расчета для образцов для образцов калия с различной концентрацией дислокаций возрастает и достигает максимума при  $T \sim 7-8$  К. Это связано с тем, что процессы фонон-фононного переброса вымораживаются, но возрастает роль процессов электрон-фононного переброса, которые не учитываются в настоящей работе. Температура активации этих процессов составляет 10–20 К, а максимальную роль они играют в интервале 5–10 К [34,35]. Согласно данным по термоэдс [18], а также анализу [35,36] процессы электрон-фононного переброса вымораживаются при температурах  $T < 4-5$  К, а при  $T < 2$  К уже доминируют нормальные процессы электрон-фононного рассеяния. Итак, при температурах ниже 30 К учет взаимного увлечения электронов и фононов приводит только к увеличению расхождения результатов расчета и экспериментальных данных. Для их согласования необходимо учитывать процессы электрон-фононного переброса. Очевидно, что анализ роли процессов электрон-фононного переброса с учетом анизотропии спектра фононов представляют самостоятельную проблему, требующую отдельного рассмотрения.

## 5. Заключение

Исследовано влияние фокусировки фононов на взаимное увлечение электронов и фононов в кристаллах калия. Основные результаты можно сформулировать следующим образом.

1. В предельном случае сильного взаимного увлечения электронов и фононов, когда доминируют нормальные процессы электрон-фононной релаксации как для

электронов, так и для фононов электросопротивление будет значительно меньше, чем дает теория Блоха–Грюнайзена. Оно определяется резистивными механизмами рассеяния фононов: на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса. В этом пределе (1) скорости дрейфа фононов всех поляризаций равны и близки к скорости дрейфа электронов; (2) они определяются суммарной скоростью релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния.

2. В противоположном предельном случае, когда для фононов доминируют резистивные процессы рассеяния, то фононная система остается в равновесии. Мы имеем предельный случай теории Блоха–Грюнайзена [5–9]: электросопротивление определяется нормальными процессами электрон-фононной релаксации. В этом случае скорости дрейфа фононов для всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов.

3. Исследована роль неупругости электрон-фононной релаксации в условиях взаимного увлечения электронов и фононов. Определены функции распределения наиболее актуальных для релаксации импульса фононов механизмов рассеяния: в процессах электрон-фононной релаксации, а также для рассеяния фононов на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса. Показано, что скорости релаксации импульса в электрон-фононных и фонон-электронных процессах рассеяния совпадают.

4. Проанализирована роль сдвиговых волн в электросопротивлении кристаллов калия. Показано, что релаксация электронов на сдвиговой компоненте медленной  $t_2$ -моды в приближении Блоха–Грюнайзена при температурах  $T \ll \Theta_D$  обеспечивает 32% полного электросопротивления, что в 4 раза превышает вклад  $L$ -фононов. В режиме сильного взаимного увлечения электронов и фононов для кристаллов калия с минимальной концентрацией дислокаций  $N_d = 0.03$  вклад сдвиговой компоненты  $t_2$ -моды в электросопротивление возрастает до 56%.

Очевидно, что теория электронного переноса в металлах нуждается в существенной переработке, связанной с учетом влияния анизотропии упругой энергии на динамические характеристики фононов.

## Финансирование работы

Работа выполнена по плану РАН в рамках темы „Функция“ № АААА-А19-119012990095-0.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] Р.Н. Гуржи, А.И. Копелиович. УФН **133**, 33 (1981).
- [2] И.Г. Ланг, С.Т. Павлов. ЖЭТФ **63**, 1495 (1972).
- [3] И.Г. Кулеев. ФТТ **42**, 1952 (2000).
- [4] Л.Э. Гуревич, И.Я. Коренблит. ФТТ **6**, 856 (1962).

- [5] F. Bloch. Zs. Phys. **59**, 208 (1930).
- [6] E. Gruneisen. Ann. Phys. **40**, 5, 543 (1941).
- [7] A. Sommerfeld, H. Bete. Elektronen Theorie der Metalle. Handbuch der Physik. Bd. 24/2 (1934).
- [8] A.H. Wilson. The Theory of Metals. Cambridge (1953).
- [9] J. Zyman. Electrons and Phonons. Oxford, N. Y. (1960).
- [10] F.J. Blatt. Physics of electron conductivity in solids. McGraw-hill book company (1968).
- [11] J. Zyman. Principles of the theory of solids. Cambridge University Press (1972).
- [12] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. Наука, М. (1978) 616 с.
- [13] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев. ЖЭТФ **156**, 56 (2019).
- [14] I.I. Kuleyev, I.G. Kuleyev. J. Phys.: Condens Matter **31**, 375701 (2019).
- [15] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев. ФММ **122**, 83 (2021).
- [16] R. Fletcher. Phys. Rev. B **36**, 3042 (1987).
- [17] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, В.В. Устинов. Фокусировка фононов и фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах. Изд-во УМЦ УПИ, Екатеринбург (2018). 256 с.
- [18] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев. ФММ **121**, 1011 (2020).
- [19] J.M. Zuman. Phil. Mag. **4**, 371 (1959).
- [20] I.G. Kuleyev, I.I. Kuleyev. Chin. J. Phys. **72**, 351 (2021).
- [21] J.W. Ekin, V.W. Maxfield. Phys Rev. B **4**, 4215 (1971).
- [22] T.C. Chi. J. Phys. Chem. Ref. Data **8**, 339 (1979).
- [23] В.П. Силин. Введение в кинетическую теорию газов. Наука, М. (1971).
- [24] Х.М. Бикин, И.И. Ляпилин. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. УрО РАН, Екатеринбург (2009).
- [25] Г. Рёпке. Неравновесная статистическая механика. Мир, М. (1990).
- [26] Ф.И. Федоров. Теория упругих волн в кристаллах. Наука, М. (1965).
- [27] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ФТТ **49**, 3, 422 (2007).
- [28] V. Truel, C. Elbaum, V.B. Chick. Ultrasonic methods in solid state physics. Academic Press, N. Y.–London (1969).
- [29] Ю.П. Кардона М. Основы физики полупроводников. Физматлит, М. (2002).
- [30] C. Herring, E. Vogt. Phys. Rev. **101**, 944 (1956).
- [31] Р. Берман. Теплопроводность твердых тел. Мир, М. (1979).
- [32] D. Gegan. Proc. R. Soc. Lond. A **325**, 223 (1971).
- [33] J.S. Dugdale. D. Gegan, Proc. R. Soc. Lond. A **270**, 186 (1962).
- [34] M. Kaveh, N. Wiser. Phys. Rev. B **9**, 4053 (1974).
- [35] F.J. Blatt, P.A. Schroeder, C.L. Foiles, D. Greig. Thermoelectric power of metals. Plenum press, N. Y.–London (1976).
- [36] P. Trofimenkoff, J.W. Ekin. Phys. Rev. B **4**, 2392(1971).

Редактор Т.Н. Василевская