

В.Н. АНТОНОВ, А.В. ЖАЛКО-ТИТАРЕНКО,  
академик АН УССР В.В. НЕМОШКАЛЕНКО

**ФОНОННОЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ КУБИЧЕСКИХ 5d-МЕТАЛЛОВ.  
РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ**

5d-металлы имеют большой атомный номер, поэтому для их электронной структуры существенны релятивистские эффекты. Несмотря на то что учет этих эффектов усложняет теоретическое определение электронной структуры и физических свойств, зонная структура 5d-металлов достаточно хорошо изучена [1]. В ряде работ [2–4] проведен расчет константы электрон-фононной связи  $\lambda$  в 5d-металлах с учетом релятивистских эффектов. В этих работах использовано приближение жесткого сдвига МТ-сфер и сферическая аппроксимация (RMТА) [5]. В то же время в литературе отсутствуют последовательные расчеты фононного электросопротивления  $\rho_{ph}(T)$  этих металлов, основанные на "первых принципах".

В работе [6] предложен метод расчета фононного электросопротивления  $\rho_{ph}(T)$  в рамках приближения RMТА и кинетическая константа электрон-фононной связи представлена в мультипликативной форме. Такое представление существенно упрощает и ускоряет расчеты  $\rho_{ph}(T)$ . Этот подход позволил авторам работ [6, 7] проанализировать тенденции изменения  $\lambda$  и  $\rho_{ph}(T)$  для всего ряда 4d-металлов в нерелятивистском пределе. Целью настоящей работы является обобщение формализма расчета  $\rho_{ph}(T)$ , развитого в работе [6], на случай учета релятивистских эффектов и вычисление температурной зависимости фононного электросопротивления в тантале, вольфраме, иридии, платине и золоте.

В интервале температур  $\theta_D/3 \lesssim T \lesssim \theta_D$ , где  $\theta_D$  – температура Дебая,  $\rho_{ph}(T)$  может быть записано в виде [8]

$$(1) \quad \rho_{ph}(T) = \frac{12\pi k_B T \Omega_0}{\hbar e^2 N(E_F) \langle V_z^2 \rangle} \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{tr}^2 F(\omega) \left[ \frac{\omega/2k_B T}{\text{sh}(\omega/2k_B T)} \right]^2,$$

$$N(E_F) = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_z^2(\mathbf{k})}{|V(\mathbf{k})|},$$

где  $\Omega_0$  – атомный объем,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\alpha_{tr}^2 F(\omega)$  – транспортная спектральная функция электрон-фононного взаимодействия. Эта функция отличается от функции Элиашберга  $\alpha^2 F(\omega)$  дополнительным множителем  $[V_z(\mathbf{k}) - V_z(\mathbf{k}')]^2$ :

$$(2) \quad \alpha_{tr}^2 F(\omega) = \frac{\Omega_0^2}{(2\pi)^6 N(E_F)} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \nu} |M_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \nu}|^2 [V_z(\mathbf{k}) - V_z(\mathbf{k}')]^2 \times \\ \times \frac{\delta(\omega - \omega^\nu(\mathbf{q}))}{|V(\mathbf{k})| \cdot |V(\mathbf{k}')|} \Big/ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{V_z(\mathbf{k})^2}{|V(\mathbf{k})| |V(\mathbf{k}')|};$$

здесь  $E_F$  – энергия Ферми,  $\omega^\nu(\mathbf{q})$  – частота фонона с волновым вектором  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$   $\nu$ -й ветви,  $M_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \nu}$  – матричный элемент электрон-фононного взаимодей-

ствия. Векторы  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  лежат на поверхности Ферми. Выражение (1) может быть переписано в факторизованном виде [6]:

$$(3) \quad \rho_{ph}(T) = \frac{6\pi k_B T}{\hbar e^2 N(E_F) \langle V_z^2 \rangle} \lambda_{tr} B(T),$$

$$B(T) = \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{tr}^2 F(\omega) \left[ \frac{\omega/2k_B T}{\text{sh}(\omega/2k_B T)} \right]^2 / \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{tr}^2 F(\omega),$$

$$(4) \quad \lambda_{tr} = 2 \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{tr}^2 F(\omega) = \eta_{tr} / M_i \langle \omega^2 \rangle_{tr},$$

$$(5) \quad \langle \omega^2 \rangle_{tr} = \left[ \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{tr}^2 F(\omega) \right]^{-1} \int_0^{\omega_D} \omega \alpha_{tr}^2 F(\omega) d\omega,$$

$$(6) \quad \eta_{tr} = \frac{\Omega_0^2}{(2\pi)^6 N(E_F) \langle V_z^2 \rangle} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{|\langle \mathbf{k}' | \nabla V_{ei} | \mathbf{k} \rangle|^2 [V_z(\mathbf{k}) - V_z(\mathbf{k}')]^2}{|V(\mathbf{k})| \cdot |V(\mathbf{k}')|},$$

где  $\lambda_{tr}$  — кинетическая константа электрон-фононной связи,  $\eta_{tr}$  — электронная часть  $\lambda_{tr}$  (кинетический параметр Хопфельда),  $|\mathbf{k}\rangle$  — волновая функция электрона с волновым вектором  $\mathbf{k}$ ,  $\nabla V_{ei}$  — изменение кристаллического потенциала при смещении иона из положения равновесия при поглощении фонона:  $\delta V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \delta R \nabla V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ .

Такой подход аналогичен приближению Хопфельда—Мак-Миллана, используемому обычно при вычислении константы электрон-фононной связи  $\lambda = \eta / M_i \langle \omega^2 \rangle$ . Учитывая, как правило, слабую частотную зависимость  $\alpha_{tr}^2(\omega)$  и  $\alpha^2(\omega)$  (см., например, [9]), можно в выражениях для  $B(T)$  и  $\langle \omega^2 \rangle_{tr}$  вынести  $\alpha_{tr}^2$  из-под интеграла в числителе и знаменателе. В таком приближении  $B(T)$  и  $\langle \omega^2 \rangle_{tr}$  будут зависеть лишь от фононной плотности состояний, а  $\eta_{tr}$  определяется лишь электронной подсистемой.

$\eta_{tr}$  можно представить в виде разности  $\eta_{tr} = \eta_{20} - \eta_{11}$ , где  $\eta_{20}$  и  $\eta_{11}$  зависят соответственно от  $V_z(\mathbf{k})^2 + V_z(\mathbf{k}')^2$  и  $V_z(\mathbf{k})V_z(\mathbf{k}')$ . Численные оценки, проведенные в [7] для всего ряда 4d-металлов, показали, что величина  $\eta_{11}$  на несколько порядков меньше, чем  $\eta_{20}$ . Аналогично [5] можно показать, что релятивистское выражение для  $\eta_{tr}$  в предположении  $\eta_{11} \ll \eta_{20}$  в рамках приближения RMTA  $\eta$  приводится к виду

$$(7) \quad \eta_{tr} = \frac{2\kappa_F^2}{\pi^2 N(E_F)} \sum_l 2(l+1) \left\{ \frac{l+2}{2l+3} D_l^+ D_{l+1}^+ \sin^2(\delta_l^+ - \delta_{l+1}^+) + \frac{l}{2l+1} D_l^- D_{l+1}^- \sin^2(\delta_l^- - \delta_{l+1}^-) + \frac{1}{(2l+1)(2l+3)} D_l^+ D_{l+1}^- \sin^2(\delta_l^+ - \delta_{l+1}^-) \right\},$$

$$(8) \quad D_l^\pm D_{l'}^\pm = \frac{1}{2} (A_l^\pm B_{l'}^\pm + A_{l'}^\pm B_l^\pm),$$

$$(9) \quad A_l^\pm = \frac{N_l^\pm(E_F)}{N_l^{(1)}(E_F)},$$

$$(10) \quad B_l^\pm = \frac{\pi N(E_F)^{-1}}{3\sqrt{E_F}(2j+1)} \sum_{\mathbf{k}} \frac{[C_l^\pm(\mathbf{k}) \cdot V_z(\mathbf{k})]^2}{|V(\mathbf{k})|},$$

где  $\delta_l^\pm(E_F)$  — релятивистские фазовые сдвиги,  $\kappa_F = E_F(1 + E_F/C^2)$ , индекс "±" означает состояния с полным моментом количества движения  $j = l \pm 1/2$ ,  $N_l^\pm(E_F)$  — парциальная плотность электронных состояний на уровне Ферми,  $N_l^{(1)}(E_F)$  — пар-

Т а б л и ц а 1

Фононное электросопротивление  $\rho_{ph}(T)$  кубических  $5d$ -металлов ( $10^6$  Ом · см)

Элемент	$T = 15$ К	81	195	273	373	473	573	Данные работы
Au	$\frac{0,017}{0,014}$	$\frac{0,532}{0,490}$	$\frac{1,472}{1,439}$	$\frac{2,090}{2,065}$	$\frac{2,901}{2,887}$	$\frac{3,679}{3,735}$	$\frac{4,456}{4,515}$	[11]
Pt	$\frac{0,031}{0,062}$	$\frac{2,142}{-}$	$\frac{6,382}{6,730}$	$\frac{9,154}{9,810}$	$\frac{12,653}{13,650}$	$\frac{16,130}{17,380}$	$\frac{19,540}{-}$	[13]
Ir	$\frac{0,004}{-}$	$\frac{0,925}{1,357}$	$\frac{4,030}{4,232}$	$\frac{6,054}{4,850}$	$\frac{8,566}{6,750}$	$\frac{11,031}{8,710}$	$\frac{13,473}{10,720}$	[13]

  

Элемент	$T = 90$ К	195,5	273	293	873	Данные работы
W	$\frac{0,858}{0,870}$	$\frac{2,803}{3,195}$	$\frac{4,154}{4,890}$	$\frac{4,458}{5,500}$	$\frac{13,284}{16,850}$	[12]
Ta	$\frac{2,950}{-}$	$\frac{7,839}{-}$	$\frac{11,330}{12,400}$	$\frac{12,212}{-}$	$\frac{36,386}{-}$	[13]

П р и м е ч а н и е. Над чертой – значения  $\rho_{ph}$ , полученные в настоящей работе, под чертой – данные эксперимента.

циальная плотность состояний одиночного МТ-рассеивателя,  $C_i^{\pm}(\mathbf{k})$  – коэффициенты разложения волновой функции электрона в кристалле по состояниям определенного момента. На основе (3)–(10) в настоящей работе проведен расчет температурной зависимости фононного электросопротивления в кубических  $5d$ -металлах. Энергетическая зонная структура этих металлов вычислялась при помощи релятивистского метода присоединенных плоских волн. Для обменно-корреляционного потенциала использовано приближение Слэтера с  $\alpha = 1$ . В отличие от работы [7], где поверхность Ферми (ПФ) определялась на основе интерполяционного метода тетраэдров по системе опорных точек в зоне Бриллюэна, в настоящей работе проводился поиск поверхности  $E(\mathbf{k}) = E_F$  путем прямого решения задачи на собственные значения в рамках метода РППВ. Такой способ весьма трудоемок, однако позволяет существенно повысить точность определения ПФ [10]. Кроме того, это позволяет проводить анализ вклада различных листов ПФ в суммарное электросопротивление путем разбиения сумм (9) и (10) на слагаемые для отдельных фрагментов ПФ.

Компоненты скорости электронов определялись путем аналитического дифференцирования интерполяционного полинома, построенного на сетке опорных точек в сферических координатах для трех изоэнергетических поверхностей  $E = E_F \pm \hbar \omega_D$ . Для золота, платины и вольфрама скорости электронов удовлетворительно согласуются с экспериментом. Учет релятивистских эффектов оказался весьма важным при расчете скоростей электронов на ПФ. В частности, переход к нерелятивистскому пределу приводит к изменению скорости электронов на эллипсоидах ПФ платины более чем в 10 раз.

Результаты расчета фононного электросопротивления кубических  $5d$ -металлов приведены в табл. 1. В целом согласие с экспериментом можно признать удовлетворительным, особенно учитывая тот факт, что в расчете отсутствуют какие-либо подгоночные параметры. Ухудшение описания  $\rho_{ph}(T)$  для низких температур связано с ограниченной применимостью формализма уравнения Больцмана в этом случае.

Представляет интерес анализ вклада в  $\rho_{ph}(T)$  процессов рассеяния от различных листов ПФ. Оказалось, что в платине основную роль играют  $d$ -состояния на дыроч-

ной многосвязной поверхности, однако их весовой вклад в  $\eta_{tr}$  меньше, чем в  $\eta$ . Хотя в электрон-фононное взаимодействие основной вклад вносит внутрилистное  $df$ -рассеяние на поверхности  $W_h$ , в случае  $\rho_{ph}(T)$  преобладает вклад  $df$ -переходов между электронной  $\Gamma_e$  поверхностью и  $W_h$ . Это обусловлено тем, что скорости электронов на  $\Gamma_e$  заметно больше соответствующих скоростей на поверхности  $W_h$ . В иридии основную роль играют состояния на большем из электронных листов ПФ вследствие их высокой плотности состояний. Основной вклад в  $\rho_{ph}(T)$ , как и в платине, вносит  $df$ -рассеяние. В вольфраме скорости носителей на дырочном октаэдре (Oct) ПФ больше, чем на электронном "валете"  $J_e$ . По этой причине электронные состояния на октаэдре ПФ дают сравнительно больший вклад в  $\eta_{tr}$ , чем в  $\eta$ . При этом главную роль играет  $J_e - \text{Oct}$   $df$ -рассеяние, в то время как для  $\eta$  определяющим является  $J_e - J_e$   $df$ -взаимодействие. В силу малой скорости электронов на эллипсоидах вклад этих листов ПФ уменьшается при переходе от  $\eta$  к  $\eta_{tr}$ . В тантале  $df$ -вклад по величине близок к таковому для иридия, платины или вольфрама, но в отличие от этих металлов  $pd$ -вклад в  $\eta$  для Та сравним с  $df$ -вкладом. Возможно, это является причиной сравнительно большей температуры перехода в сверхпроводящее состояние для этого металла. Состояния на дырочном октаэдре ПФ тантала дают незначительный вклад как в  $\eta$ , так и в  $\eta_{tr}$ . Несмотря на то что для всех металлов вклад  $sp$ -взаимодействия как в  $\eta$ , так и в  $\eta_{tr}$  пренебрежимо мал, роль  $s$ -электронов в фононном электросопротивлении возрастает по сравнению с электрон-фононным взаимодействием.

В заключение авторы выражают благодарность В. Йону за полезные дискуссии и замечания.

Институт металлофизики  
Академии наук УССР  
Киев

Поступило  
17 XIII 1985

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Nemoshkalenko V.V., Antonov V.N., Antonov V.I.N. et al.* – Phys. Status solidi (b), 1982, vol. 111, № 1, p. 11–52.
2. *Shmidt B., Antonov V.N., Mrösan E.* – Proc. X Inter. conf. El. Str. Met. and Alloys, 1980, Gaussig, DDR, p. 60–65.
3. *Немошкаленко В.В., Жалко-Титаренко А.В., Антонов В.Н., Антонов В.Н.* – Металлофизика, 1983, т. 5, с. 18–25.
4. *Nemoshkalenko V.V., Zhalko-Titarenko A.V., Antonov V.N.* – Sol. Stat. Commun., 1984, vol. 49, p. 35–38.
5. *Hamman D.* Zur Theorie der Electron-Phonon Wandihelwirkung in Ubergansmetallen. – Thesis, TV Dresden, 1978, p. 177.
6. *Mazin I.I., Savitskii E.M., Uspenskii Yu.A.* – Phys. Status Solidi (b), 1982, vol. 112, p. K29–K33.
7. *Мазин И.И.* Микроскопическое исследование электрон-фононного взаимодействия в переходных металлах и сплавах. Автореф. канд. дис. М., 1984. 18 с.
8. *Allen P.B.* – Phys. Rev. B, 1978, vol. 17, p. 3725–3734.
9. *Pinski F.J., Allen P.B., Butler W.H.* – Phys. Rev. B, 1981, vol. 23, p. 5080–5096.
10. *Немошкаленко В.В., Жалко-Титаренко А.В., Антонов В.Н.* – Физ. низк. температур, 1983, т. 9, с. 1249–1262.
11. *Cook J.C., van der Meer M.P.* – Cand. J. Phys., 1970, vol. 48, p. 245–259.
12. *Волькенштейн Н.В., Старостина Л.С., Старцев В.Е., Романов Е.П.* – ФММ, 1964, т. 18, с. 888–894.
13. Таблицы физических величин/Под ред. И.К. Кикоина. М.; Атоиздат, 1976, 1008 с.