



Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

V. N. Antonov, A. V. Zhalko-Titarenko,
V. V. Nemoshkalenko, Phonon electrical resistivity of
the cubic $5d$ -metals. Relativistic calculation,
Dokl. Akad. Nauk SSSR, 1986, Volume 291,
Number 2, 337–340

<https://www.mathnet.ru/eng/dan47736>

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you
have read and agreed to these terms of use

<https://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.14.84

April 19, 2025, 02:16:01



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 λ в 5d-металлах с учетом релятивистских эффектов. В этих работах использовано приближение жесткого сдвига МТ-сфер и сферическая аппроксимация (RMTA) [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 RMTA 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 λ 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 θ_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 Ω_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 $[V_z(\mathbf{k}) - V_z(\mathbf{k}')]^2$:

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

здесь E_F – энергия Ферми, $\omega^\nu(\mathbf{q})$ – частота фонона с волновым вектором $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ν -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 λ_{tr} — кинетическая константа электрон-фононной связи, η_{tr} — электронная часть λ_{tr} (кинетический параметр Хопфельда), $|\mathbf{k}\rangle$ — волновая функция электрона с волновым вектором \mathbf{k} , ∇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 α_{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 η_{tr} определяется лишь электронной подсистемой.

η_{tr} можно представить в виде разности $\eta_{tr} = \eta_{20} - \eta_{11}$, где η_{20} и η_{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 η_{11} на несколько порядков меньше, чем η_{20} . Аналогично [5] можно показать, что релятивистское выражение для η_{tr} в предположении $\eta_{11} \ll \eta_{20}$ в рамках приближения РМТА η 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	<u>0,017</u> 0,014	<u>0,532</u> 0,490	<u>1,472</u> 1,439	<u>2,090</u> 2,065	<u>2,901</u> 2,887	<u>3,679</u> 3,735	<u>4,456</u> 4,515	[11]
Pt	<u>0,031</u> 0,062	<u>2,142</u> —	<u>6,382</u> 6,730	<u>9,154</u> 9,810	<u>12,653</u> 13,650	<u>16,130</u> 17,380	<u>19,540</u> —	[13]
Ir	<u>0,004</u> —	<u>0,925</u> 1,357	<u>4,030</u> 4,232	<u>6,054</u> 4,850	<u>8,566</u> 6,750	<u>11,031</u> 8,710	<u>13,473</u> 10,720	[13]
Элемент	$T = 90$ К	195,5	273	293	873	Данные работы		
W	<u>0,858</u> 0,870	<u>2,803</u> 3,195	<u>4,154</u> 4,890	<u>4,458</u> 5,500	<u>13,284</u> 16,850	[12]		
Ta	<u>2,950</u> —	<u>7,839</u> —	<u>11,330</u> 12,400	<u>12,212</u> —	<u>36,386</u> —	[13]		

П р и м е ч а н и е. Над чертой — значения ρ_{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 η_{tr} меньше, чем в η . 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 Γ_e поверхностью и W_h . Это обусловлено тем, что скорости электронов на Γ_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 η_{tr} , чем в η . При этом главную роль играет $J_e - \text{Oct}$ df -рассеяние, в то время как для η определяющим является $J_e - J_e$ df -взаимодействие. В силу малой скорости электронов на эллипсоидах вклад этих листов ПФ уменьшается при переходе от η к η_{tr} . В тантале df -вклад по величине близок к таковому для иридия, платины или вольфрама, но в отличие от этих металлов pd -вклад в η 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 η , так и в η_{tr} . Несмотря на то что для всех металлов вклад sp -взаимодействия как в η , так и в η_{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. Schmidt B., Antonov V.N., Mörsan 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.И. – Металлофизика, 1983, т. 5, с. 18–25.
4. Nemoshkalenko V.V., Zhalko-Titareno 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.