

УДК 537.311.31

©1995

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В АМОРФНЫХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ

В. Т. Швец

Одесский институт низкотемпературной техники и энергетики,
270057, Одесса, Украина
(Поступила в Редакцию 15 июля 1994 г.)

Вычислены коэффициенты электропроводности и электронного вклада в теплопроводность переходных неупорядоченных металлов, обладающих относительно низким электросопротивлением. С единых позиций рассмотрены аморфные и жидкие, а также простые и немагнитные переходные металлы. Для электронов проводимости использовано приближение почти свободных электронов. В качестве основных механизмов, обуславливающих рассеяние электронов проводимости, выбраны электрон-ионное взаимодействие, потенциал гибридизации s - и d -состояний электронов проводимости и электрон-фононное взаимодействие. В рамках ранее предложенного автором подхода обратные времена релаксации для различных кинетических процессов вычислены во втором порядке теории возмущений по первым двум из указанных взаимодействий и в произвольном порядке по электрон-фононному взаимодействию. Введена в рассмотрение и вычислена в гармоническом приближении новая структурная функция металла. Исследована температурная зависимость рассматриваемых кинетических коэффициентов в широком диапазоне температур.

Электросопротивление аморфных металлов обладает одной интересной особенностью, носящей название корреляций Муиджи. Суть ее в том, что сопротивление аморфных металлов с ростом температуры возрастает для металлов с относительно низким электросопротивлением и убывает для металлов с относительно высоким электросопротивлением. Границей между двумя этими случаями служит электросопротивление порядка $150\text{--}200 \mu\Omega \cdot \text{см}$. При этом в первом случае при очень низких температурах электросопротивление растет с температурой пропорционально квадрату температуры, а затем более медленно [1,2]. Майзел и Коут сумели объяснить такое поведение электросопротивления в аморфных металлах в рамках формулы Займана [1], однако если такое объяснение кажется вполне приемлемым для простых металлов, то для переходных аморфных металлов оно более чем спорно.

Более адекватным для переходных аморфных металлов нам представляется подход, основанный на идее Мотта о том, что основным эффектом, обуславливающим электросопротивление переходных неупорядоченных металлов, является гибридизация s - и d -состояний электронов проводимости [3].

В последующие годы этот подход достаточно широко использовался для расчетов электросопротивления переходных жидких металлов [4,5]. Каких-либо попыток учесть в его рамках электрон-фононное взаимодействие не предпринималось, а потому он не применялся для расчета электросопротивления переходных аморфных металлов при низких температурах, когда электрон-фононное взаимодействие существенно. Цель данной статьи — восполнить указанный пробел.

1. Гамильтониан модели

Для простоты мы ограничимся здесь рассмотрением лишь трех механизмов, обуславливающих электросопротивление неупорядоченных переходных металлов. Такими механизмами являются s - d -гибридизация, электрон-фононное и электрон-ионное взаимодействия. При этом мы, естественно, теряем возможность исследования магнитных переходных металлов и ограничиваемся рассмотрением металлов с относительно низким сопротивлением.

В рамках указанных ограничений гамильтониан электронной подсистемы металла может быть выбран в виде

$$H = H_e + H_{ee} + H_g. \quad (1)$$

Здесь

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}} + V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} W_0(\mathbf{q}) \rho^i(\mathbf{q}) \rho^e(-\mathbf{q}), \quad (2)$$

$$H_{ee} = (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_0(\mathbf{q}) A_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ A_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ A_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}}, \quad (3)$$

$$H_g = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}, n} \left[\Delta_{\mathbf{k}n} A_{\mathbf{k}}^+ B_n + \Delta_{n\mathbf{k}} B_n^+ A_{\mathbf{k}} \right], \quad (4)$$

где $A_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии с волновым вектором \mathbf{k} , B_n^+ , B_n — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии n , включающем как номер иона, так и набор квантовых чисел, характеризующих состояние электрона на ионе, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$, $W_0(\mathbf{q})$ — фурье-образ псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия, $V_0(\mathbf{q})$ — фурье-образ кулоновского потенциала электрон-электронного взаимодействия, $\Delta_{\mathbf{k}n}$, $\Delta_{n\mathbf{k}}$ — матричные элементы потенциала гибридизации s - и d -состояний электронов проводимости, $\rho^i(\mathbf{q})$, $\rho^e(\mathbf{q})$ — фурье-образы плотности ионов и оператора плотности электронов соответственно, V — объем системы.

2. Время релаксации для процесса электропроводности

Ранее нами для обратных времен релаксации τ_{σ}^{-1} и τ_{\varkappa}^{-1} , характеризующих процессы электропроводности и теплопроводности, были получены следующие выражения [6-8]:

$$\tau_{\sigma}^{-1} = -\frac{m\hbar}{3e^2 n_e k_B T V} \text{Im} \langle \langle \dot{\mathbf{I}}_{\sigma}(t) \dot{\mathbf{I}}_{\sigma}(0) \rangle \rangle_0, \quad (5)$$

$$\tau_{\varkappa}^{-1} = -\frac{m\hbar}{\pi^2 k_B^3 T^3 n_e V} \text{Im} \langle \langle \dot{\mathbf{I}}_{\varkappa}(t) \dot{\mathbf{I}}_{\varkappa}(0) \rangle \rangle_0. \quad (6)$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по каноническому ансамблю,

$$I_{\sigma} = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} k A_{\mathbf{k}}^{+} A_{\mathbf{k}} \quad (7)$$

— оператор электрического тока,

$$I_{\kappa} = \frac{\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} k (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) A_{\mathbf{k}}^{+} A_{\mathbf{k}} \quad (8)$$

— оператор потока тепла, μ — химический потенциал электронов проводимости.

Для нахождения обратных времен релаксации в нашем порядке теории возмущений достаточно вычислить производные операторов электрического тока и потока тепла по времени. В данном случае

$$\dot{I}_{\sigma} = i \frac{e}{mV} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} W_0(\mathbf{q}) \rho^i(-\mathbf{q}) \rho^e(\mathbf{q}) - i \frac{e}{mV^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} k [\Delta_{\mathbf{k}n} A_{\mathbf{k}}^{+} B_n - \Delta_{n\mathbf{k}} B_n^{+} A_{\mathbf{k}}]. \quad (9)$$

Если для матричных элементов потенциала гибридизации использовать традиционное приближение

$$\Delta_{\mathbf{k}n} = \Delta(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k}R_n), \quad (10)$$

где \mathbf{R}_n — радиус-вектор n -го иона, то после подстановки выражений (9), (10) в выражение (5) получим

$$\tau_{\sigma}^{-1} = \tau_{\sigma W}^{-1} + \tau_{\sigma \Delta}^{-1}. \quad (11)$$

Вклад в обратное время релаксации $\tau_{\sigma W}^{-1}$, обусловленный рассеянием электронов проводимости на ионных остовах, ранее нами уже подробно обсуждался [6,8], поэтому приведем лишь конечный результат

$$\tau_{\sigma W}^{-1} = \frac{1}{6\pi m V_0 k_B T} \int_0^{\infty} dq q^4 W_0(q) \int_0^{\infty} d\omega S^i(q, \omega) S^e(-q, -\omega). \quad (12)$$

Здесь $S^i(q, \omega)$, $S^e(-q, -\omega)$ — динамические двухчастичные структурные факторы соответственно ионной и электронной подсистем.

Вклад в обратное время релаксации $\tau_{\sigma \Delta}^{-1}$, обусловленный рассеянием электронов проводимости потенциалом гибридизации, в рамках подхода (5), (6) рассматривается нами впервые

$$\begin{aligned} \tau_{\sigma \Delta}^{-1} = & \frac{1}{6V^2 n_e m k_B T} \sum_{\mathbf{k}, n} k^2 \Delta^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} dt \times \\ & \times \left\{ \langle \exp\{-i\mathbf{k}[\mathbf{R}_n(t) - \mathbf{R}_n(0)]\} A_{\mathbf{k}}^{+}(t) B_n(t) B_n^{+}(0) A_{\mathbf{k}}(0) \rangle + \right. \\ & \left. + \langle \exp\{i\mathbf{k}[\mathbf{R}_n(t) - \mathbf{R}_n(0)]\} B_n^{+}(t) A_{\mathbf{k}}(t) A_{\mathbf{k}}^{+}(0) B_n(0) \rangle \right\}. \quad (13) \end{aligned}$$

Если учесть, что усреднение в выражении (13) необходимо выполнять независимо по электронным и ионным переменным, а также использовать известное спектральное соотношение для запаздывающих функций Грина, то выражение (13) можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \tau_{\sigma\Delta}^{-1} = & \frac{\hbar}{6\pi V^2 n_e m k_B T} \sum_{\mathbf{k}, n} k^2 \Delta^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\exp(-\hbar\omega/k_B T) - 1} \times \\ & \times \left\{ \text{Im} \langle \langle A_{\mathbf{k}}^+(t) B_n(t), B_n^+(0) A_{\mathbf{k}}(0) \rangle \rangle_{\omega} \cdot \langle \exp\{-ik[\mathbf{R}_n(t) - \mathbf{R}_n(0)]\} \rangle_{-\omega} + \right. \\ & \left. + \text{Im} \langle \langle B_n^+(t) A_{\mathbf{k}}(t), A_{\mathbf{k}}^+(0) B_n(0) \rangle \rangle_{\omega} \cdot \langle \exp\{ik[\mathbf{R}_n(t) - \mathbf{R}_n(0)]\} \rangle_{-\omega} \right\}. \quad (14) \end{aligned}$$

Здесь

$$\langle \langle A^+(t) B(0) \rangle \rangle = \frac{1}{i\hbar} \theta(t) \langle [A^+(t), B(0)] \rangle \quad (15)$$

— двухвременная запаздывающая функция Грина.

Входящие в выражение (14) функции Грина достаточно вычислить в нулевом порядке по потенциалу гибридизации. В этом случае

$$[\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_n + \hbar\omega] \langle \langle A_{\mathbf{k}}^+(t) B_n(t), B_n^+(0) A_{\mathbf{k}}(0) \rangle \rangle_{\omega} = n(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - n(\varepsilon_n), \quad (16)$$

где

$$n(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \langle A_{\mathbf{k}}^+(0) A_{\mathbf{k}}(0) \rangle, \quad n(\varepsilon_n) = \langle B_n^+(0) B_n(0) \rangle$$

— функции распределения электронов соответствующих подсистем. В результате для обратного времени релаксации получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \tau_{\sigma\Delta}^{-1} = & \frac{\hbar}{6V^2 n_e m} \sum_{\mathbf{k}, n} k^2 \Delta^2(k) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_n) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \hbar\omega/k_B T}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \times \\ & \times \left\{ \langle \exp\{-ik[\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(0)]\} \rangle_{\omega} \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_F + \hbar\omega) + \right. \\ & \left. + \langle \exp\{ik[\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(0)]\} \rangle_{\omega} \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_F - \hbar\omega) \right\}. \quad (17) \end{aligned}$$

Здесь мы учли, что характерные частоты ионной подсистемы на несколько порядков ниже характерных частот электронной подсистемы, и воспользовались известными свойствами функции Ферми-Дирака в случае вырожденного ферми-газа. Переходя далее от суммирования по энергиям d -состояний и волновому вектору \mathbf{k} к интегрированию по ним, имеем

$$\tau_{\sigma\Delta}^{-1} = \frac{n_e}{\hbar} \Delta^2(k_F) G(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\hbar\omega/k_B T}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \text{SF}(k, \omega). \quad (18)$$

Здесь $G(\varepsilon_F)$ — плотность состояний d -электронов, нормированная на число d -состояний, приходящихся на один ион,

$$SF(k, \omega) = \text{Re} \langle \exp\{-ik[R(t) - R(0)]\} \rangle_\omega \quad (19)$$

— структурная функция ионной подсистемы.

В приближении случайных фаз для электронной подсистемы можно получить

$$\tau_{W_2}^{-1} = \frac{m}{12\pi^3 \hbar^3 z} \int_0^{2k_F} dq q^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{S^i(q, \omega) \hbar\omega / k_B T}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1} \frac{W_0^2(q)}{|\varepsilon(q, \omega)|^2}, \quad (20)$$

где $\varepsilon(q, \omega)$ — диэлектрическая проницаемость электронов проводимости.

Формула (18) получена нами впервые и справедлива для жидких и аморфных переходных металлов во всем температурном интервале их существования. Она не содержит каких-либо существенных упрощающих предположений относительно динамики ионной подсистемы и предоставляет широкие возможности для учета влияния электрон-фононного взаимодействия на электросопротивление переходных неупорядоченных металлов.

3. Время релаксации для процесса теплопроводности

Для рассматриваемого модельного гамильтониана производная оператора потока тепла по времени будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \dot{I}_x = & i \frac{1}{mV} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left[(\mathbf{k} + \mathbf{q})(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mu) - \mathbf{k}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \right] \times \\ & \times \left[W_0(-\mathbf{q}) A_{\mathbf{k}}^+ \rho^i(-\mathbf{q}) A_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + V_0(-\mathbf{q}) A_{\mathbf{k}}^+ \rho^e(-\mathbf{q}) A_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right] + \\ & + (-i) \frac{e}{mV^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \left[\Delta_{\mathbf{k}n} A_{\mathbf{k}}^+ B_n - \Delta_{n\mathbf{k}} B_n^+ A_{\mathbf{k}} \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Подставляя это выражение в соотношение (6), в низшем порядке теории возмущений получим

$$\tau_x^{-1} = \tau_{xW}^{-1} + \tau_{xE}^{-1} + \tau_{x\Delta}^{-1}. \quad (22)$$

Здесь первые два слагаемых описывают рассеяние электронов проводимости на флуктуациях плотности ионов и электронов проводимости. Эти вклады подробно анализировались нами ранее [6], поэтому приведем лишь окончательный результат

$$\begin{aligned} \tau_{xW}^{-1} + \tau_{xE}^{-1} = & \frac{m}{12\pi^3 \hbar^3 N_e} \int_0^{2k_F} dq q^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\hbar\omega / k_B T}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1} \times \\ & \times \left[1 + 3(\hbar\omega / k_B T)^2 (k_F^2 / q^2 - 1/6) / \pi^2 \right] \left\{ N_i W_0^2(q) S^i(q, \omega) + (N_e N_i)^{1/2} \times \right. \\ & \left. \times W_0(q) V_0(q) \left[S^{ie}(q, \omega) + S^{ei}(q, \omega) \right] + N_e V_0^2(q) S^e(q, \omega) \right\}. \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь $S^{ie}(q, \omega)$, $S^{ei}(q, \omega)$, $S^e(q, \omega)$ — смешанные электрон-ионные и электрон-электронный структурные факторы соответственно.

В приближении случайных фаз для электронов проводимости имеем [6]

$$\tau_{\ast W}^{-1} = \frac{m}{12\pi^3 \hbar^3 z} \int_0^{2k_F} dq q^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\hbar\omega/k_B T}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \cdot \frac{W_0(q)}{[\varepsilon(q, \omega)]^2} \times \\ \times S^i(q, \omega) [1 + 3(\hbar\omega/k_B T)^2 (k_F^2/q^2 - 1/6)/\pi^2], \quad (24)$$

$$\tau_{\ast E}^{-1} = \frac{m^3}{12\pi^5 \hbar^6 n_e z} \int_0^{2k_F} dq q^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\hbar\omega/k_B T}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \cdot \frac{\hbar\omega}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)} \times \\ \times \frac{V_0^2(q)}{[\varepsilon(q, \omega)]^2} [1 + 3(\hbar\omega/k_B T)^2 (k_F^2/q^2 - 1/6)/\pi^2]. \quad (25)$$

Вклад в обратное время релаксации, обусловленный рассеянием электронов проводимости потенциалом гибридизации, для процессов электропроводности и теплопроводности совпадает

$$\tau_{\ast \Delta}^{-1} = \tau_{\sigma \Delta}^{-1}. \quad (26)$$

4. Структурная функция ионной подсистемы

Представим радиус-вектор ионов \mathbf{R}_n в виде

$$\mathbf{R}_n(t) = \mathbf{R}_n + \mathbf{U}_n(t), \quad (27)$$

где \mathbf{R}_n задает равновесное положение n -го иона, а $\mathbf{U}_n(t)$ — его отклонение от положения равновесия. Тогда

$$SF(\mathbf{k}, \omega) = N^{-1} \left\langle \sum_n \exp\{-i\mathbf{k}[\mathbf{U}_n(t) - \mathbf{U}_n(0)]\} \right\rangle_{\omega}. \quad (28)$$

Считая смещения $\mathbf{U}_n(t)$ достаточно малыми, разложим структурную функцию в степенной ряд по этим смещениям

$$SF(\mathbf{k}, t) = \sum_{m=0}^{\infty} SF_m(\mathbf{k}, t), \quad (29)$$

где $SF_0(\mathbf{k}, t) = 1,$ (30)

$$SF_1(\mathbf{k}, t) = 0, \quad (31)$$

поскольку $\langle \mathbf{U}_n(t) \rangle = 0,$

$$SF_2(\mathbf{k}, t) = N^{-1} \left\langle \sum_n (-i) \{ \mathbf{k}[\mathbf{U}_n(t) - \mathbf{U}_n(0)] \}^2 \right\rangle \quad (32)$$

и т.д.

Сами смещения разложим далее в ряд Фурье

$$U_n(t) = V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}(t) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_n), \quad (33)$$

$$U_{\mathbf{q}}(t) = \int d\mathbf{R}_n \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_n) U_n(t). \quad (34)$$

В результате выражение (14) можно записать в виде

$$\begin{aligned} SF_2(\mathbf{k}, t) = \left\langle N^{-1} V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \left\{ [\mathbf{k}U_{\mathbf{q}_1}(t)][\mathbf{k}U_{\mathbf{q}_2}(0)] - \right. \right. \\ \left. \left. - [\mathbf{k}U_{\mathbf{q}_1}(0)][\mathbf{k}U_{\mathbf{q}_2}(0)] \right\} \exp[i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)\mathbf{R}_n] \right\rangle. \end{aligned} \quad (35)$$

Члены более высокого порядка по смещениям в данной работе мы рассматривать не будем.

Для неупорядоченных систем имеет место следующее свойство:

$$\left\langle N^{-1} \sum_n \exp[i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)\mathbf{R}_n] \right\rangle = \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2). \quad (36)$$

Произведя в выражении (35) независимое усреднение по фоновым степеням свободы и конфигурационное усреднение по равновесным положениям ионов с учетом соотношения (36), а также ограничиваясь в выражении (29) первыми тремя членами разложения, имеем

$$\begin{aligned} SF(k, \omega) = 2\pi\delta(\omega) \cdot \left[1 - V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \left\langle [\mathbf{k}U_{\mathbf{q}}(0)][\mathbf{k}U_{-\mathbf{q}}(0)] \right\rangle \right] + \\ + V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \left\langle [\mathbf{k}U_{\mathbf{q}}(t)][\mathbf{k}U_{-\mathbf{q}}(0)] \right\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (37)$$

Для нахождения средних, входящих в выражение (35), перейдем к представлению вторичного квантования по плоским волнам

$$U_n(t) = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}(q)}} \cdot \left\{ A_{\mathbf{q}\lambda}(t) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_n) + A_{\mathbf{q}\lambda}^+(t) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_n) \right\} e_{\mathbf{q}\lambda}, \quad (38)$$

где $A_{\mathbf{q}\lambda}^+$, $A_{\mathbf{q}\lambda}$ — операторы рождения и уничтожения фононов в состоянии с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ , $e_{\mathbf{q}\lambda}$ — вектор поляризации, M — масса иона, $\omega_{\lambda}(q)$ — закон дисперсии фононов.

В приближении невзаимодействующего фононного газа выражение (35) легко вычисляется и для модели Дебая

$$V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \left\langle [\mathbf{k}U_{\mathbf{q}}(t)][\mathbf{k}U_{-\mathbf{q}}(0)] \right\rangle_{\omega} = \frac{\hbar k^2 v_0}{\pi M c^3} \omega \begin{cases} 0; & \omega < 0, \omega > \omega_D, \\ 1 + n(\omega); & 0 \leq \omega \leq \omega_D, \end{cases} \quad (39)$$

где ω_D — дебаевская частота.

Второе слагаемое в квадратных скобках в правой части выражения (35) представляет собой не что иное, как фактор Дебая-Валлера. В рамках используемой модели

$$V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \langle [kU_{\mathbf{q}}(0)][kU_{-\mathbf{q}}(0)] \rangle = \frac{k^2 v_0 k_B^2 T^2}{4\pi M c^3 \hbar} \delta(\omega) \int_0^{T_D/T} dx x [n(x) + 1/2], \quad (40)$$

где T_D — температура Дебая, $n(x) = \{\exp(x) - 1\}^{-1}$.

Температурно-зависящий сомножитель в формуле для обратных времен релаксации теперь примет вид

$$\begin{aligned} F(T) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\hbar\omega/k_B T}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \text{SF}(k, \omega) = \\ &= 1 - \frac{k^2 v_0 k_B^2 T^2}{4\pi^2 M c^3 \hbar} \int_0^{T_D/T} dx x \left\{ \frac{1}{\exp(x) - 1} + \frac{1}{2} \right\} + \\ &+ \frac{k^2 v_0^2 k_B^2 T^2}{2\pi^2 M c^3 \hbar} \int_0^{T_D/T} dx \frac{x^2}{[\exp(x) - 1][1 - \exp(-x)]}. \end{aligned} \quad (41)$$

5. Обсуждение

Полученные нами выражения для времен релаксации, характеризующие процессы электропроводности и теплопроводности, в одинаковой мере справедливы для жидких и аморфных металлов, но несправедливы для кристаллических металлов. Для последних отсутствует механизм рассеяния, обусловленный s - d -гибридизацией. Для простых металлов эффект гибридации не существует, и полученные нами формулы переходят в хорошо известную формулу Займана. Для типичных переходных металлов можно пренебречь вкладом, обусловленным псевдопотенциалом электрон-ионного взаимодействия. Если при этом пренебречь также электрон-фононным взаимодействием, то получим хорошо известный результат Мотта [3]

$$\tau_{\Delta}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \Delta^2(k_F) G(E_F). \quad (42)$$

Температурная зависимость времен релаксации для процессов электропроводности и теплопроводности в неупорядоченных простых металлах хорошо исследована в широком диапазоне температур. Из полученных выражений видно, что в области высоких температур эти времена практически совпадают, а в области низких температур существенно отличаются, что и приводит к нарушению закона Видемана-Франца в этом диапазоне температур.

Интересно отметить, что соответствие соответствующих времен релаксации для неупорядоченных переходных металлов никак не связано с эффектом гибридизации и целиком обусловлено теми вкладами в обратные времена релаксации, которые являются общими для простых и переходных металлов. При учете лишь эффекта гибридизации и электрон-фононного взаимодействия закон Видемана-Франца строго выполняется во всем интервале температур. Проанализируем температурную зависимость электросопротивления именно в этом случае.

В приближении времени релаксации электросопротивление металла прямо пропорционально обратному времени релаксации, которое в свою очередь прямо пропорционально температурной функции $F(T)$. При низких температурах ($T_D/T \gg 1$), когда все используемые в отношении фоновой подсистемы приближения справедливы в наибольшей степени, имеем

$$F(T) = 1 - \frac{3m\varepsilon_F}{4M\varepsilon_D} + 6 \frac{\pi^2 m\varepsilon_F T^2}{4M\varepsilon_D T_D^2}, \quad (43)$$

где $\varepsilon_D = \hbar\omega_D$.

Таким образом, с ростом температуры электросопротивление растет по закону T^2 , что полностью согласуется с экспериментом для переходных аморфных металлов [1,2].

В области высоких температур ($T_D/T \ll 1$)

$$F(T) = 1 - \frac{3m\varepsilon_F}{4M\varepsilon_D} + 3 \frac{m\varepsilon_F T}{M\varepsilon_D T_D}, \quad (44)$$

электросопротивление зависит от температуры линейным образом, что хорошо согласуется с экспериментальными данными для жидких металлов, хотя в этом случае используемые приближения справедливы в наименьшей мере.

Предложенная нами для электросопротивления переходных неупорядоченных металлов формула не дает (и в принципе не должна давать) убывающего с ростом температуры электросопротивления, характерного для металлов с относительно большим электросопротивлением. Для таких металлов электропроводность носит диффузионный характер и будет являться предметом нашего последующего рассмотрения.

Список литературы

- [1] Металлические стекла. Ионная структура, электронный перенос и кристаллизация / Под ред. Г. Гюнтеродта и Г. Бека. М. (1983).
- [2] Аморфные металлические сплавы / Под ред. Ф.Е. Люборского. М. (1987).
- [3] Mott N.F. Phil. Mag. **26**, 1, 1249 (1972).
- [4] Швец В.Т. ТМФ **53**, 1, 146 (1982).
- [5] Швец В.Т. УФЖ **30**, 4, 545 (1985).
- [6] Швец В.Т. ТМФ **86**, 1, 111 (1991).
- [7] Швец В.Т. УФЖ **36**, 4, 581 (1991).
- [8] Швец В.Т. ФТТ **33**, 1, 261 (1991).