

УДК 539.21

## ФОНОННЫЙ СПЕКТР

### И ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ИРИДИИ

*С. Н. Крайнюков, А. В. Хоткевич, И. К. Янсон,  
А. В. Жалко-Титаренко, В. Н. Антонов, В. В. Немошкаленко,  
В. Ю. Мильман, Ю. Л. Шитиков, М. Н. Хлопкин*

Методами измерения дважды дифференциального сечения рассеяния нейтронов и микроконтактной спектроскопии определены фононный и микроконтактный спектры иридия. Расчет этих спектров продемонстрировал удовлетворительное согласие с экспериментом. В результате расчета установлена роль отдельных листов поверхности Ферми в электрон-фононном взаимодействии для иридия и показано, что для этого металла микроконтактная функция ЭФВ близка к кинетической. Исследовано влияние анизотропии ЭФВ на результат расчета константы электрон-фононной связи.

Настоящая работа является продолжением начатого в [1] исследования электрон-фононного взаимодействия в платиновых металлах. В отличие от ранее исследованной платины иридий не позволяет провести измерения дисперсии фононов в силу большого сечения захвата ( $\sim 10^3$  барн) нейтронов. Этим обусловлено то, что в настоящей работе наряду с измерениями и расчетами спектральных функций электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) проведены измерения и последующие расчеты спектральной плотности фононов, являющиеся неизбежным этапом в исследовании ЭФВ.

Спектральная плотность фононов в иридии определялась на основании измерений дважды дифференциального сечения рассеяния нейтронов. Расчет фононного спектра и спектральной плотности фононов выполнен в рамках модели [2]. Для исследования ЭФВ в иридии использованы методы микроконтактной спектроскопии [3]. С целью выяснения природы тонкой структуры микроконтактных спектров наряду с экспериментальными измерениями проведен расчет спектральных функций ЭФВ «из первых принципов» по методике [1, 4, 5]. При расчете ЭФВ использована ранее построенная поверхность Ферми иридия [6].

В разделе 1 излагаются результаты измерения и расчета фононного спектра, в разделе 2 — результаты экспериментальных исследований ЭФВ в иридии. Раздел 3 посвящен расчету спектральных функций ЭФВ и других характеристик электрон-фононного взаимодействия в этом металле.

#### 1. Фононный спектр иридия

Нейтронные измерения в настоящей работе проводились на время-пролетном спектрометре [7]. С целью выяснения надежности используемой методики построения спектральной плотности фононов  $F(\omega)$  было проведено исследование фононного спектра меди, что позволило отработать методику восстановления  $F(\omega)$  в некогерентном приближении с учетом многократных и многофононных процессов. Оказалось, что для меди при нейтронных измерениях удастся получить более надежную информацию о спектральной плотности фононов, вплоть до положения и масштаба всех основных особенностей спектра, чем при восстановлении  $F(\omega)$

из данных о теплоемкости. Важно отметить и то, что в области низких энергий данные, полученные из нейтронных и теплоемкостных измерений, совпадают. Измерения для меди позволили нам с достаточной степенью уверенности применить развитую методику к исследованию фононного спектра иридия. Измерения дважды дифференциального сечения рассеяния холодных нейтронов проводились на иридиевой фольге толщиной 0,2 мм. При этом доля рассеянных нейтронов составляла менее 1 %, а поглощение 75 %. Полученные результаты позволили восстановить спектральную плотность фононов иридия (рис. 1).



Восстановленный спектр имеет достаточно резкую границу и затянутый агармонический «хвост» при энергиях, больших, чем граничное значение (26 мэВ). Высоко- и низкоэнергетический максимумы спектра имеют соответственно энергии 22 и 17 мэВ, точность определения относительной интенсивности пиков 10 %.

В области низких энергий измеренная спектральная плотность фононов существенно отличается от восстановленной из данных по теплоемкости и не демонстрирует дебаевской зависимости. Видимо, это связано с влиянием когерентных эффектов, проявляющихся вследствие малой толщины образца.

Спектральная плотность фононов не содержит объема информации, достаточного для использования моделей силовых постоянных типа [8], или модели Борна—Кармана. Вместе с тем расчет спектральных функций ЭФВ по методике [4, 5] требует информации о фононном спектре в произвольной точке зоны Бриллюэна. Это побудило использовать для описания фононного спектра иридия ранее развитую нами [2] модель энергии связи переходного металла, основанную на применении метода псевдопотенциала для описания

Рис. 1. Фононный спектр иридия.

Сверху вниз: экспериментальный спектр (наст. раб.), расчет [1], расчет [10], расчет методом псевдопотенциала (наст. раб.).

s-электронов, и сильного парного потенциала для описания d-электронов. Эта модель содержит всего четыре параметра и позволяет добиться вполне удовлетворительного согласия расчета и эксперимента для спектральной плотности фононов [2].

Результаты расчета спектральной плотности фононов в иридии приведены на рис. 1. Более подробное изложение методики расчета приведено в [2, 7]. Видно, что общая структура рассчитанной  $F(\omega)$  близка к экспериментально наблюдаемой. Как экспериментальная, так и рассчитанная зависимость  $F(\omega)$  не имеют характерного для многих ГЦК металлов «плеча» в низкоэнергетической части низкочастотного максимума; хотя рассчитанная зависимость  $F(\omega)$  и шире экспериментальной, предельная частота для нее ниже, чем для ранее рассчитанных  $F(\omega)$  [9, 10].

Все вышеизложенное позволяет считать описание фононного спектра иридия в модели [2] удовлетворительным и использовать полученный фононный спектр при дальнейших расчетах.

## 2. Электрон-фононное взаимодействие в иридии: эксперимент

Для изучения ЭФВ в иридии использовался метод микроконтактной (МК) спектроскопии [3], который в настоящее время является единственным экспериментальным методом получения спектральных функций ЭФВ в переходных металлах со слабым ЭФВ.

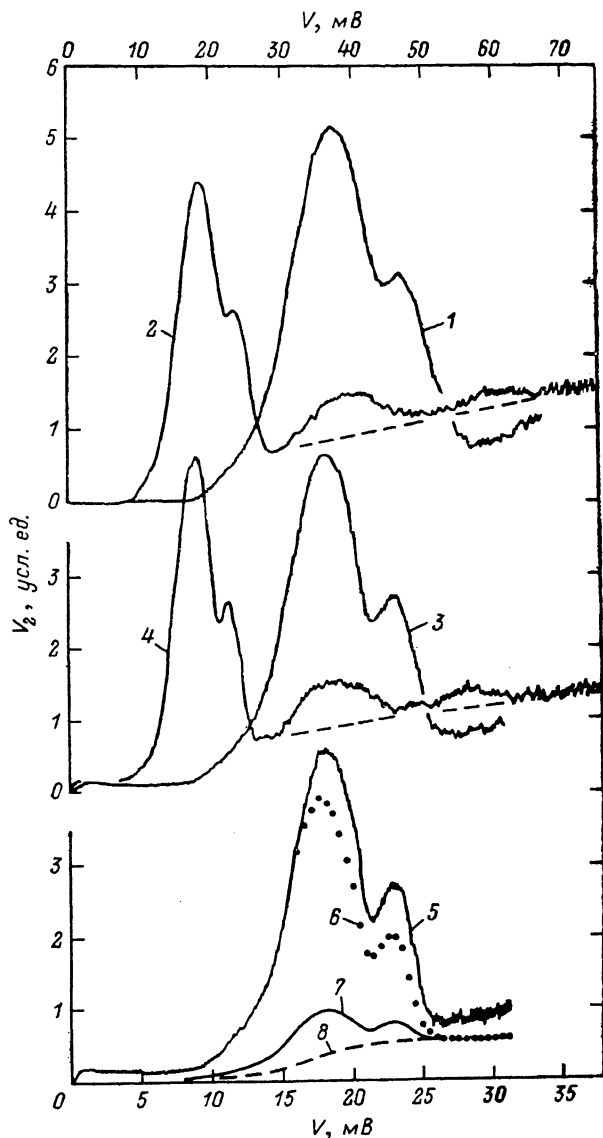


Рис. 2. Микроконтактные спектры ЭФВ  $V_2(V) \propto d^2V/dI^2(V)$  (1—5) и основные зависимости, определяемые при восстановлении микроконтактной функции ЭФВ  $\bar{V}_2(V) \propto d^2I/dV^2(V)$  (6), функции фона (7, 8).

Для 1, 2, 3:  $R_0 = 8.6, 5.8, 9.5$  Ом,  $V_{1,0} = 382, 441, 408$  мкВ ( $V_{1,0} = V_1$  при  $V=0$ ),  $V_{2,max} = 0.70, 0.77, 0.71$  мкВ.

Микроконтакты создавались аналогично [1] в жидком гелии по сдвиговой технологии между электрополированными электродами из монокристаллического иридия с отношением  $R_{300\text{ К}}/R_{4.2\text{ К}} = 150$ . Ориентация

оси микроконтакта относительно главных кристаллографических направлений была случайной. Измерялись величина сопротивления микроконтакта  $R_0$  при  $V=0$  и зависимости напряжений  $V_1(V)$  и  $V_2(V)$  первой и второй гармоник сигнала модулирующего тока, пропорциональные производным  $\text{BAH } dV/dI(V)$  и  $d^2V/dI^2(V)$  (последнюю зависимость называют микроконтактным спектром). Все измерения проведены при температуре 1.5 К, так что разрешение МК спектров по энергии при использовавшихся уровнях модулирующего сигнала  $V_1$  составляло  $\approx 1$  мэВ.

Для восстановления МК функции ЭФВ из экспериментальных данных использовалась методика, описанная ранее [1, 11].

Подробные измерения были проведены для 35 наиболее чистых микроконтактов. На рис. 2 показаны спектры трех микроконтактов, характеризующие воспроизводимость результатов. Для двух микроконтактов приведены зависимости  $V_2(V)$  в различном масштабе по напряжению. Кривым 2, 4 соответствует шкала напряжений в верхней части рисунка. Штриховыми линиями на этих зависимостях выделены максимумы, обусловленные двух- и трехфононными процессами ЭФВ. Видно, что однофононная часть МК спектра ЭФВ в иридии характеризуется двумя максимумами в районе 17.5 и 23.5 мэВ, что хорошо соответствует положению максимумов на экспериментальной зависимости  $F(\omega)$  (рис. 1). Для функций  $g_{pc}(\omega)$ , восстановленных из различных МК спектров, ва-

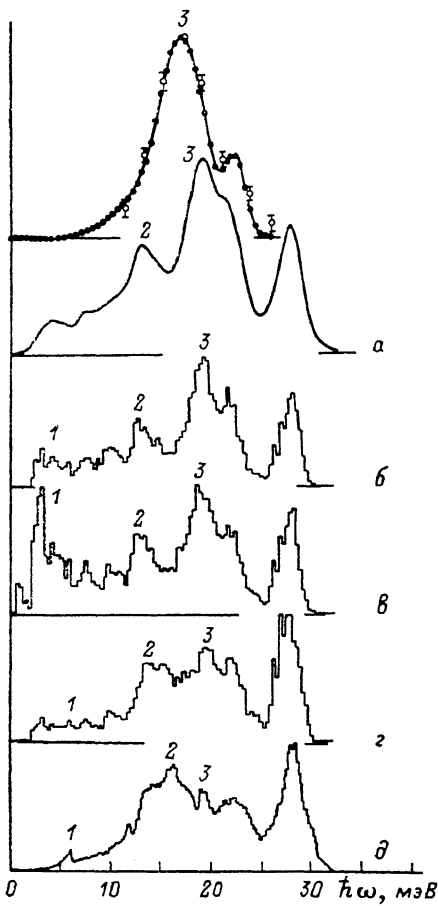


Рис. 3. Интегральные по поверхности Ферми спектральные функции ЭФВ.

$a - g(\omega)$ ,  $б - \alpha_{ir}^2(\omega)F(\omega)$ ,  $в - \alpha^2(\omega)F(\omega)$ ,  $г - F_{FG}(\omega)$ ,  $д - F(\omega)$ .

риации формы и относительной интенсивности максимумов были невелики. Количественные характеристики разброса данных приведены на рис. 3, где сплошной линией показана функция  $g_{pc}(\omega)$ , восстановленная из МК спектра 5 на рис. 2, а точками и усами отмечены значения, полученные усреднением по 10 функциям  $g_{pc}(\omega)$ . Значения средней и среднеквадратичной частот фононов  $\langle \omega \rangle_{pc}$  и  $\langle \omega^2 \rangle_{pc}$  равны соответственно  $16.5 \pm 0.2$  и  $293 \pm 6$  мэВ<sup>2</sup> (усреднение по 10  $g_{pc}(\omega)$ ; здесь и на рис. 3 указаны среднее арифметическое значение и его ошибка).

Установлено, что использование функции  $g_{pc}(\omega)$ , полученной на основе экспериментальных данных как приближения для плотности фононных состояний, обеспечивает лучшее описание известных калориметрических данных, чем использование  $F(\omega)$  из [9, 10].

### 3. Электрон-фононное взаимодействие в иридии: расчет «из первых принципов»

Метод расчета спектральных функций ЭФВ в тяжелых переходных металлах подробно описан в [1, 4, 5]. В настоящей работе мы следуем

той же методике расчета в рамках приближения жесткого МТ рассеивателя при полном учете релятивистских эффектов и анизотропии поверхности Ферми. С целью выяснения роли отдельных листов поверхности Ферми в электрон-фононном рассеянии в настоящей работе мы предлагаем использовать спектральные функции ЭФВ для межлистового рассеяния, определяемые как

$$F_{FS}(\omega)^{LL'} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 N(0)} \sum_{\nu} \int_{S_L} \frac{dS}{v_{\mathbf{k}}} \int_{S_{L'}} \frac{dS'}{v_{\mathbf{k}'}} \delta(\omega - \omega^{\nu}(\mathbf{q})), \quad (1)$$

$$\alpha^2(\omega) F(\omega)^{LL'} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 N(0)} \sum_{\nu} \int_{S_L} \frac{dS}{v_{\mathbf{k}}} \int_{S_{L'}} \frac{dS'}{v_{\mathbf{k}'}} |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\nu}| \delta(\omega - \omega^{\nu}(\mathbf{q})), \quad (2)$$

$$\alpha_{ir}^{2-}(\omega) F(\omega)^{LL'} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 N(0) \langle v_x \rangle} \sum_{\nu} \int_{S_L} \frac{dS}{v_{\mathbf{k}}} \int_{S_{L'}} \frac{dS'}{v_{\mathbf{k}'}} (v_{k_x} - v_{k'_x})^2 \times \\ \times |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\nu}|^2 \delta(\omega - \omega^{\nu}(\mathbf{q})), \quad (3)$$

$$g_{pc}(\omega)^{LL'} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 N(0)} \sum_{\nu} \int_{S_L} \frac{dS}{v_{\mathbf{k}}} \int_{S_{L'}} \frac{dS'}{v_{\mathbf{k}'}} K(\mathbf{k}, \mathbf{k}') |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\nu}|^2 \delta(\omega - \omega^{\nu}(\mathbf{q})), \quad (4)$$

где  $L, L'$  — номера листов поверхности Ферми;  $\omega^{\nu}(\mathbf{q})$  — частота фонона поляризации с волновым вектором  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ;  $N(0)$  — плотность состояний на уровне Ферми;  $v_{\mathbf{k}}$  — скорость электрона;  $\mathbf{k}$  — фермиевский импульс. Интегрирование в (1)–(4) ведется по листам  $L$  и  $L'$  поверхности Ферми, определяемой в настоящей работе на основании расчета «из первых принципов». Ясно, что свертка (1)–(4) по индексам  $L$  и  $L'$  дает спектральные функции ЭФВ для полной ПФ. В то же время использование функций (1)–(4) позволяет получить более подробную информацию о природе тонкой структуры спектральных функций ЭФВ.

Для количественного описания ЭФВ естественно использовать константу электрон-фононной связи  $\lambda_{ep}$ . В результате интегрирования интегральной по ПФ функции ЭФВ  $\alpha^2(\omega) F(\omega)$  (рис. 3) получено значение  $\lambda_{ep} = 0.223$ . Эта величина весьма близка к ранее полученной [6] в приближении Хопфельда—Мак-Миллана ( $\lambda_H = 0.25$ ) и к константе перенормировки одночастичного спектра ( $\tilde{\lambda} = 0.28$ ), полученной в той же работе. Величины  $\lambda_H$  и  $\lambda_{ep}$  получены для одной и той же поверхности Ферми и рассеивающего потенциала; параметр Хопфельда, определенный в настоящей работе в результате интегрирования  $\alpha^2(\omega) F(\omega)$ , и параметр, найденный в [6, 12], фактически совпадают. Поэтому отличие в численных значениях  $\lambda_{ep}$  и  $\lambda_H$  может быть связано с тем, что в настоящей работе и в [6, 12] использованы различные спектральные плотности фононов, а также с тем, что  $\alpha^2(\omega)$  сильно анизотропно.

Величина второго момента для спектральной плотности фононного спектра, использованного в настоящем расчете, составляет 372.95 мэВ<sup>2</sup>. Это весьма близко к экспериментальному значению (376 мэВ<sup>2</sup>) и существенно меньше величины, использованной в [6, 12] (490 мэВ<sup>2</sup>). Таким образом, использование более корректного фононного спектра в рамках приближения Хопфельда—Мак-Миллана должно привести к повышению  $\lambda_H$ , в то время как последовательно рассчитанная величина  $\lambda_{ep}$  меньше полученной в этом приближении. Таким образом, в качестве главной причины отличия  $\lambda$ , полученных в предыдущих и в настоящей работе, следует считать анизотропию матричного элемента ЭФВ  $\alpha^2(\omega)$ .

Результаты (рис. 4) позволяют установить причины такой анизотропии. Видно, что при переходе от  $F(\omega)$  к спектральной плотности фононов, участвующих в ЭФВ,  $F_{FS}(\omega)$  происходит перераспределение интенсивностей максимумов в области низкоэнергетического пика  $F(\omega)$ . Из анализа парциальных вкладов от различных процессов рассеяния видно,

что главную роль в этом перераспределении интенсивности играют состояния на большем из дырочных листов ПФ (рис. 5). Дальнейшее усиление максимума при 17 мэВ происходит за счет анизотропии ЭФВ, связанной с межлистовым рассеянием для эллипсоидов ПФ. Помимо возрастания интенсивности максимума  $3$  при переходе от  $F(\omega)$  к  $\alpha^2 F(\omega)$  происходит резкое возрастание максимума  $1$ , связанное с внутрилистовым рассеянием на меньшем электронном кармане. Из сопоставления функции Элиашберга  $\alpha^2 F(\omega)$  и кинетической функции ЭФВ  $\alpha_{tr}^2 F(\omega)$

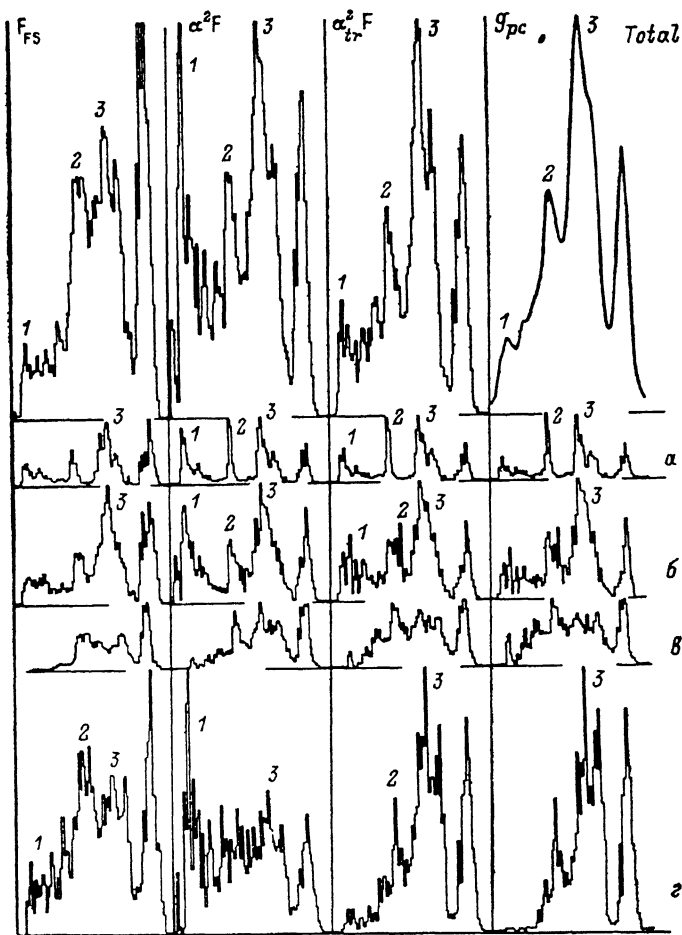


Рис. 4. Вклады рассеяния между отдельными участками поверхности Ферми в электрон-фононное взаимодействие в иридии.  $X_3-X_3$  (а),  $X_3-X_4$  (б),  $\Gamma_8-X_4$  (в),  $\Gamma_6-\Gamma_8$  (г).

ясно, что максимум  $1$  на  $\alpha^2 F(\omega)$  может быть связан с состояниями на плоском участке ПФ в направлении  $[011]$ , для которых векторы рассеяния невелики, а значения  $V_{kz}$  и  $V_{k'z}$  фактически совпадают, что ведет к резкому различию формы  $\alpha^2(\omega)_{tr} F(\omega)$  и  $\alpha^2(\omega) F(\omega)$  в области низких частот и к подавлению максимума  $1$  при переходе от  $\alpha^2(\omega) F(\omega)$  к  $\alpha_{tr}^2(\omega) \times F(\omega)$ . Косвенным подтверждением более сильного электрон-фононного рассеяния для состояний на указанном участке ПФ может служить ранее обнаруженное [6] возрастание на 20 % константы перенормировки одночастичного спектра при переходе от орбит, не пересекающих этот участок, к нецентральной орбите, проходящей через него. Важно отметить, что  $\lambda_{ep}$  лишь в незначительной мере определяется состояниями на большем из электронных листов ( $\Gamma_5$ ) ПФ. Этим, видимо, объясняется сравнительно слабая перенормировка одночастичного спектра для состояний на этом листе ПФ [6].

Интересно отметить, что полученные в результате расчета функции  $g_{pc}(\omega)$  и  $\alpha_{ir}^2(\omega) F(\omega)$  очень близки. Таким образом, по крайней мере для иридия экспериментальная микроконтактная спектральная функция ЭФВ  $g_{pc}(\omega)$  может считаться достаточно хорошим приближением для кинетической функции ЭФВ  $\alpha_{ir}^2(\omega) F(\omega)$ . Действительно, при отсечке фона, согласно [11], можно получить  $\lambda_{pc}=0.37$ . Используя ранее найденную для более грубой модели фононного спектра [12] кинетическую константу ЭФВ и найденное в настоящей работе значение второго момента  $\langle \omega^2 \rangle$ , можно получить  $\lambda_{ir}=0.34$ , что весьма близко к  $\lambda_{pc}$ .

Сопоставление результатов расчета и эксперимента для  $g_{pc}(\omega)$  (рис. 3) позволяет заключить, что все основные отличия связаны с использованным при расчете фононным спектром. Сильная анизотропия  $\alpha^2(\omega)$ , связанная как со структурой ПФ, так и с анизотропией матричного элемента  $M_{kk'}$ , является причиной существенного возрастания максимума при 17 мэВ при переходе от фононного к микроконтактному спектру; то, что реальный спектр (рис. 1) существенно уже использованного при расчете, ведет к подавлению максимума  $I$  на экспериментальной зависимости  $g_{pc}(\omega)$ .

Полученные результаты позволяют сделать следующие основные выводы. Фононный спектр иридия имеет простую структуру с двумя максимумами

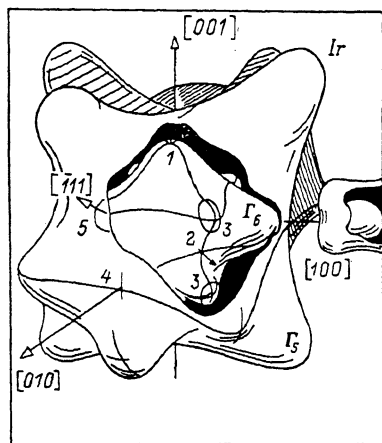


Рис. 5. Поверхность Ферми иридия.

при 17 и 22 мэВ. Расчет в модели [2] позволяет получить спектральную плотность фононов, находящуюся в разумном согласии с экспериментом. Положение максимумов на микроконтактном спектре определяется положением максимумов фононного спектра. Возрастание интенсивности максимума при 17 мэВ при переходе от фононного к микроконтактному спектру обусловлено главным образом анизотропией матричного элемента ЭФВ  $\alpha^2(\omega)$ , в равной мере связанной со структурой ПФ и с анизотропией  $M_{kk'}$ . Расчеты в приближении Хопфельда—Мак-Миллана и путем интегрирования функции Элиашберга дают значения константы ЭФВ, отличающиеся не более чем на 8 % (для иридия), что при учете частотной анизотропии ЭФВ в этом металле может быть принято за верхнюю границу для погрешности, вносимой при использовании упомянутого приближения.

Форма спектральных функций ЭФВ  $g_{pc}(\omega)$  и  $\alpha_{ir}^2 F(\omega)$  очень близка, что позволяет при расчете кинетических свойств иридия использовать экспериментальный микроконтактный спектр этого металла. Основная причина отличия рассчитанной и экспериментальной функций  $g_{pc}(\omega)$  состоит в несовершенстве использованного при расчете фононного спектра, чем определяется направление дальнейших теоретических исследований электрон-фононной системы иридия.

Авторы выражают благодарность Филипу Б. Аллену, В. Г. Ваксу, А. П. Жернову за полезные обсуждения и В. Е. Старцеву, любезно предоставившему в наше распоряжение монокристаллический образец иридия.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Крайнюков С. К., Хоткевич А. В., Янов И. К. и др. // ФНТ. 1988. Т. 14. № 3. С. 235—245.  
 [2] Немопкаленко В. В., Мильман В. Ю., Жалко-Титаренко А. В. // УФЖ. 1985. Т. 30. № 9. С. 1372—1381.

- [3] Янсон И. К., Хоткевич А. В. Атлас микроконтактных спектров электрон-фонового взаимодействия в металлах. Киев, 1985. 143 с.
- [4] Zhalko-Titarenko A. V., Antonov V. N., Nemoshkalenko V. V., John W. // Phys. St. Sol. (b). 1985. V. 132. N 1. P. K15—K18.
- [5] Немошкаленко В. В., Жалко-Титаренко А. В., Антонов В. Н. // ФНТ. 1987. Т. 13. № 5. С. 544—546.
- [6] Nemoshkalenko V. V., Zhalko-Titarenko A. V., Antonov V. N. // Sol. St. Comm. 1984. V. 49. N 1. P. 35—38.
- [7] Немошкаленко В. В., Мильман В. Ю., Жалко-Титаренко А. В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 5. С. 245—248.
- [8] Sharma P. K., Joshi S. K. // J. Chem. Phys. 1963. V. 39. N 10. P. 2633—2638.
- [9] Treglia G., Desjonqueres M.-C. // J. de Phys. 1985. V. 46. N 6. P. 984—1000.
- [10] Mehrotra K. N., Tambay R. G., Kapur S. K. // Rev. Roum. Phys. 1980. V. 25. N 2. P. 157—161.
- [11] Кулик И. О. // ФНТ. 1985. Т. 11. № 9. С. 937—950.
- [12] Жалко-Титаренко А. В. // ФТВД. 1988. Т. 27. С. 27—38.

Институт металлофизики  
АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
29 августа 1988 г.