ANNALES UNIVERSITATIS MARIAE CURIE-SKŁODOWSKA
LUBLIN–POLONIA
VOL. XXXIV/XXXV, 2 SECTIO AAA 1979/1980

Instytut Fizyki UMCS
Zakład Fizyki Teoretycznej
Kierownik: prof. dr hab. Stanisław Szpikowski

Karol Izydor WYSOKIŃSKI, Ryszard TARANKO, Ewa TARANKO

Wpływ rozpraszania elektron-fonon na zmiennoprądowe przewodnictwo stopów

Влияние температуры на высокочастотную электропроводительность неупорядоченных сплавов

The Effect of Temperature on the Ac Electrical Conductivity of Disordered Alloys

WSTĘP

Wzrost zainteresowania układami nieuporządkowanymi, w szczególności stopami spowodowany jest z jednej strony własnościami tych materiałów, z drugiej zaś rozwojem metod teoretycznego ich badania [1].

Większość prac dotyczących zjawisk transportu ogranicza się do badania stałoprądowego przewodnictwa elektrycznego [2–6]. Mało uwagi, jak dotąd, poświęcono własnościom optycznym [7–10]. Prace [5, 6] wskazały na silny wpływ rozpraszania elektron-fonon na stałoprądowe przewodnictwo stopu, którego składniki posiadają niejednakowe szerokości pasm. Uwzględnienie różnych szerokości pasm składników związane jest z przyjęciem losowych pozadiagonalnych elementów macierzowych w wyjściowym hamiltonianie. Wprowadzenie nieporządku termicznego spowodowanego rozpraszaniem fali elektronowej na drganiach sieci wiąże się z dodatkowym uśrednieniem (obok uśrednienia konfiguracyjnego) po zespole fononowym.

W rezultacie w metodzie potencjału koherentnego (CPA) równania stają się skomplikowanymi równaniami całkowymi. Uśrednienie fononowe sprowadza się do obliczenia średniej z funkcją rozkładu typu Gaussa [3, 5]

$$P_n(\eta) = (2\pi \alpha_n)^{-1/2} \exp(-\eta^2 / 2\alpha_n) \qquad (1)$$

$n = A, B, C, \ldots$

w której parametry rozkładu α_n zależą od rodzaju atomu w węźle n i są proporcjonalne do czynnika Debye'a-Wallera [3], a więc i do temperatury (dla niezbyt niskich temperatur). Oszacowania wartości liczbowych dają [3]:

$$\alpha_n = (0{,}02 \div 0{,}08)\,T/T_n^0 \qquad n = A, B, C, \ldots \tag{2}$$

gdzie T_n^0 jest temperaturą topnienia składnika w stopie. Fakt, że α_n jest bardzo małe ($\alpha_n \ll 1$), nawet dla dość wysokich temperatur, stanowi podstawę zaproponowanego ostatnio sposobu [11] obliczania temperaturowych poprawek do np. gęstości stanów stopu, bez konieczności rozwiązywania całkowego warunku CPA.

Celem tej pracy jest zbadanie wpływu rozpraszania elektron-fonon na zmiennoprądowe przewodnictwo stopów, których składniki mają różne szerokości pasm. Chcemy wyrazić $\sigma(\omega)$ w postaci

$$\sigma(\omega) = \sigma_0(\omega) + \alpha\sigma_1(\omega) \tag{3}$$

gdzie z definicji $\sigma_0(\omega)$ oznacza przewodnictwo stopu bez uwzględnienia rozpraszania na fononach, a $\sigma_1(\omega)$ stanowi wkład do przewodnictwa indukowany fononami.

ROZWIĄZANIA PERTURBACYJNE

Niech hamiltonian stopu będzie dany w reprezentacji Wanniera

$$H = H_e + H_T \tag{4}$$

$$H_e = \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| + h^0 \sum_{n \neq m}\sum |n\rangle \xi_n \xi_m \langle m| \tag{5}$$

gdzie operator

$$H_T = \sum_n |n\rangle \theta_n \langle n| \tag{6}$$

odpowiedzialny jest za rozpraszanie elektron-fonon.

Wszystkie człony hamiltonianu są losowe. Postępując podobnie jak w pracach [5, 12], otrzymujemy standardowy w tym modelu warunek CPA, zmodyfikowany wspomnianą średnią fononową:

$$\langle\langle(\Sigma - (z - \epsilon_n - \theta_n)\xi_n^{-2})/[1 - [\Sigma - (z - \epsilon_n - \theta_n)\xi_n^{-2}]\,F(z)]\rangle_T\rangle_C = 0 \tag{7}$$

Znak $\langle\ldots\rangle_T$ oznacza uśrednienie ze względu na θ_n z funkcją rozkładu (1), natomiast $\langle\ldots\rangle_C$ wskazuje na konieczność uśrednienia po konfiguracjach – z funkcją rozkładu dla stopu o s składnikach

$$P(\epsilon_n) = \sum_{i=1}^{3} x_i \delta(\epsilon_n - \epsilon_i)$$

gdzie x_i oznacza koncentrację i-tego składnika w stopie $\sum_i x_i = 1$.

Drugim równaniem na funkcję $\Sigma(z)$ jest [5]:

$$F(z) = \int D_0(E)\, dE \,/\, (\Sigma(z) - E) \tag{8}$$

$D_0(E)$ oznacza tu gęstość stanów układu opisanego hamiltonianem

$$H_0 = h^0 \sum_{n \neq m}\sum | n \rangle\langle m | \tag{9}$$

Równanie (7) przekształcimy do postaci wygodniejszej w dalszych rozważaniach:

$$F(z) = \langle I_n \rangle_C$$

$$I_n = (2\pi\alpha\gamma_n)^{-1/2} \int d\eta \exp(-\eta^2/2\gamma_n)/[F^{-1} - \Sigma + (z - \epsilon_n - \eta)\xi_n^{-2}] \tag{10}$$

$$\alpha_n = \alpha\gamma_n\,,\ \alpha \ll 1,\ \gamma_n \approx 1\,,\ n = A, B, C, \ldots$$

Podobnie jak w pracy [5] rozwijamy funkcje F, Σ, I_n w szereg potęg α z dokładnością do wyrazów liniowych:

$$F(z) = F_0(z) + \alpha F_1(z)\,,\ F_1(z) = (\partial F/\partial\alpha)|_{\alpha=0}$$

$$\Sigma(z) = \Sigma_0(z) + \alpha\Sigma_1(z)\,,\ \Sigma_1(z) = (\partial\Sigma/\partial\alpha)|_{\alpha=0} \tag{11}$$

$$I_n(z) = I_n^0(z) + \alpha I_n^1(z)$$

$$I_n^1(z) = (\partial I_n/\partial\alpha + \partial I_n/\partial F \cdot F_1 + \Sigma_1 \partial I_n/\partial\Sigma)|_{\alpha=0} \tag{12}$$

Porównując we wzorze (10) współczynniki przy tych samych potęgach α otrzymamy:

$$F_0(z) = \langle I_n^0 \rangle_C \tag{13}$$

gdzie:

$$I_n^0 = [F_0^{-1} - \Sigma_0 + (z - \epsilon_n)\xi_n^{-2}]^{-1} \tag{14}$$

oraz

$$F_1(z) = \langle I_n^1 \rangle_C \tag{15}$$

Równanie (8), wiążące Σ i F, daje w omawianym przybliżeniu zależności:

$$F_0 = \int D_0(E)dE/(\Sigma_0 - E) \tag{16}$$

oraz

$$F_1 = -\Sigma_1 \int D_0(E)dE/(\Sigma_0 - E)^2 = \Sigma_1 \partial F_0/\partial\Sigma_0 \tag{17}$$

Równania (13), (14) i (16) służą do wyznaczenia statycznych wartości funkcji F i Σ. Liniowe ze względu na α wyrażenie Σ_1 otrzymamy po wstawieniu do wzoru (15) wyrażeń (12) i (17) oraz po uwzględnieniu wartości pochodnych [11]:

$$(\partial I_n/\partial\alpha)|_{\alpha=0} = \gamma_n \xi_n^{-4}(I_n^0)^3$$

$$(\partial I_n/\partial F)|_{\alpha=0} = (I_n^0)^2/F_0^2$$

$$(\partial I_n/\partial\Sigma)|_{\alpha=0} = (I_n^0)^2 \tag{18}$$

Ostateczny wynik otrzymamy w postaci:

$$\Sigma_1 = \langle\gamma_n \xi_n^{-4}(I_n^0)^3\rangle(\partial\Sigma_0/\partial F_0)/\langle 1 - (I_n^0)^2(F_0^{-2} + \partial\Sigma_0/\partial F_0)\rangle \ . \tag{19}$$

ZMIENNOPRĄDOWE PRZEWODNICTWO ELEKTRYCZNE

Odpowiedzialną za absorpcję część tensora przewodnictwa elektrycznego przedstawimy w postaci wzoru Kubo-Greenwooda:

$$\sigma^{\alpha\beta}(\omega) = 2\pi e^2/(\Omega m^2)\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta[f(\eta) - f(\eta+\omega)]/\omega \cdot \langle\langle Tr[p^\alpha\delta(\eta - H)p^\beta\delta(\eta + H)]\rangle_T\rangle_C \tag{20}$$

gdzie $\langle\langle ...\rangle_T\rangle_C$ oznacza uśrednienie konfiguracyjne i po zespole fononowym. Stałe e i m oznaczają ładunek i masę elektronu, Ω – objętość próbki, a p^α – składową α operatora pędu. Funkcja $f(\eta)$ jest funkcją rozkładu Fermiego-Diraca.

Korzystając ze znanej tożsamości [2]

$$2\pi i\delta(\eta - H) = G(\eta - i0) - G(\eta + i0)$$

oraz z faktu, że przetransformowany hamiltonian H [12] posiada losowe jedynie elementy diagonalne, możemy otrzymać wyrażenie na tensor przewodnictwa dla sieci kubicznej w postaci zawierającej tylko przetransformowane funkcje Σ [12]:

$$\sigma(\omega) = c\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta[f(\eta) - f(\eta+\omega)]/\omega\int dEv^2(E)\Phi(E,\eta,\omega) \tag{21}$$

$$\Phi(E,\eta,\omega) = |\mathrm{Im}\,\Sigma(\eta)|\cdot|\mathrm{Im}\,\Sigma(\eta+\omega)|/[(\mathrm{Re}\,\Sigma(\eta) - E)^2 + (\mathrm{Im}\,\Sigma(\eta))^2]\cdot$$

$$\cdot[(\mathrm{Re}\,\Sigma(\eta+\omega) - E)^2 + (\mathrm{Im}\,\Sigma(\eta+\omega))^2] \tag{22}$$

$$v^2(E) = N^{-1} \sum_{\vec{k}} (\partial E_0(\vec{k})/\partial k_x)^2 \partial(E - E_0(\vec{k})) \tag{23}$$

$E_0(\vec{k})$ jest transformatą Fouriera operatora H_0.

Rozkładając funkcję Σ w szereg względem parametru α [11], możemy wzór na przewodnictwo przedstawić w postaci:

$$\sigma(\omega) = \sigma_0(\omega) + \alpha\sigma_1(\omega)$$

gdzie:

$$\sigma_0(\omega) = c \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta [f(\eta) - f(\eta + \omega)] / \omega \cdot \int dE v^2(E)\, \Phi_0(E, \eta, \omega) \tag{24}$$

$$\sigma_1(\omega) = c \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta [f(\eta) - f(\eta + \omega)] / \omega \cdot \operatorname{sign} X \cdot \int dE v^2(E)\, \Phi_0(E, \eta, \omega) A(E, \eta, \omega)$$

$$\Phi_0(E, \eta, \omega) = |\mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta)|\, |\mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta + \omega)| / [(\mathrm{Re}\, \Sigma_0(\eta) - E)^2 + (\mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta))^2] \cdot$$
$$\cdot [(\mathrm{Re}\, \Sigma_0(\eta + \omega) - E)^2 + (\mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta + \omega))^2] \tag{25}$$

$$A(E, \eta, \omega) = \mathrm{Im}\, \Sigma_1(\eta) / \mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta) + \mathrm{Im}\, \Sigma_1(\eta + \omega) / \mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta + \omega) + \Phi_0(E, \eta, \omega) \cdot$$
$$\cdot [\Lambda(E, \eta) \Psi(E, \eta + \omega) + \Lambda(E, \eta + \omega) \Psi(E, \eta)] / (\mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta)\, \mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta + \omega))$$

$$X = \mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta)\, \mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta + \omega) + \alpha(\mathrm{Im}\, \Sigma_1(\eta)\, \mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta + \omega) + \mathrm{Im}\, \Sigma_0(\eta)\, \mathrm{Im}\, \Sigma_1(\eta + \omega)$$

$$\Lambda(x, y) = 2 [(\mathrm{Re}\, \Sigma_0(y) - x)\, \mathrm{Re}\, \Sigma_1(y) + \mathrm{Im}\, \Sigma_0(y)\, \mathrm{Im}\, \Sigma_1(y)]$$

$$\Psi(x, y) = (\mathrm{Re}\, \Sigma_0(y) - x)^2 + (\mathrm{Im}\, \Sigma_0(y))^2 .$$

Z powyższych wzorów wynika, że składnik $\sigma_0(\omega)$ odpowiada przewodnictwu zmiennoprądowemu bez uwzględnienia rozproszeń elektronów na fononach [12], natomiast składnik $\sigma_1(\omega)$ stanowi liniowy względem parametru α wkład do przewodnictwa indukowany fononami.

PIŚMIENNICTWO

1. Elliott R. J., Krumhansl J. A., Leath P. L.: Rev. Mod. Phys. 46, 465 (1973).
2. Velicky B.: Phys. Rev. 184, 614 (1969).
3. Chen A. B., Weisz G., Sher A.: Phys. Rev. B5, 2897 (1972).
4. Fukuyama H., Krakauer H., Schwartz L.: Phys. Rev. B10, 1137 (1974).
5. Wysokiński K. I.: J. Phys. C11, 291 (1978).
6. Kolley E., Kolley W.: Phys. Stat. Sol. b 79, 325 (1977).
7. Velicky B., Levin K.: Phys. Rev. B2, 938 (1970).
8. Esterling D. M.: Sol. State Comm. 15, 351 (1974).
9. Brauwers M., Brouers F.: Phys. Stat. Sol. b 75, 519 (1976).
10. Parlebas J. C., Mills D. L.: Phys. Rev. B18, 3988 (1978).
11. Wysokiński K. I., Piłat M.: Phys. Stat. Sol. b 95, 369 (1979).
12. Taranko E., Wysokiński K. I., Taranko R., Piłat M.: Z. Physik B39, 187 (1980).

РЕЗЮМЕ

В рамках приближения когерентного потенциала исследовано влияние электрон-фононного взаимодействия на высокочастотную электропроводительность металлических сплавов с любым числом компонентов. Формализм применено к случаю недиагонального беспорядка, что эквивалентно предположении о различной ширине энергетических зон компонентов сплава. Вычислено низкотемпературную поправку к проводимости $\sigma_1(\omega)$.

SUMMARY

The effect of electron-phonon scattering on the ac electrical conductivity of disordered alloys is investigated in the framework of coherent potential approximation. The formalism is used to the case where the one-particle Hamiltonian includes thermal diagonal and compositional diagonal and off-diagonal disorders.

The low-temperature correction to the ac electrical conductivity – $\sigma_1(\omega)$ – is calculated.

Złożono w Redakcji 27 XII 1979 roku.