

Теория остаточного электросопротивления разбавленных сплавов немагнитных $3d-5d$ переходных металлов

Ю.Ю. Циовкин, А.Н. Волошинский, В.В. Гапонцев, В.В. Устинов

ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18, 620041, Россия
E-mail: y.tsiovkin@imp.uran.ru

Статья поступила в редакцию 27 февраля 2006 г., после переработки 10 марта 2006 г.

Методом кинетического уравнения с учетом двухполосного характера проводимости при малой концентрации примеси выполнен расчет остаточного электросопротивления разбавленных сплавов немагнитных переходных металлов. Показано, что для всех разбавленных немагнитных бинарных сплавов типа замещения значения остаточного электросопротивления являются линейной функцией квадрата модуля недиагонального $s-d$ матричного элемента T -матрицы рассеяния.

Методом кінетичного рівняння з урахуванням двосмугового характеру провідності при малій концентрації домішки виконано розрахунок залишкового електроопору розбавлених сплавів немагнітних перехідних металів. Показано, що для всіх розбавлених немагнітних бинарних сплавів типу заміщення значення залишкового електроопору є лінійною функцією квадрата модуля недиагонального $s-d$ матричного елемента T -матриці розсіювання.

PACS: 72.15.-v

Ключевые слова: кинетическое уравнение, электросопротивление, разбавленный сплав.

1. Введение

Экспериментально и теоретически надежно установлено, что остаточное электросопротивление (ОЭС) разбавленных (до 5 ат.% примеси) сплавов прямо пропорционально концентрации примесных ионов [1]. Классическими правилами Линде и Фриделя [2,3] устанавливается пропорциональность прироста ОЭС (на 1 ат.% примеси) квадрату разности валентностей сплавляемых металлов. Для разбавленных сплавов с участием переходных металлов классические правила дают либо существенно завышенные [4], либо заниженные значения ОЭС, что вызвано использованием ряда приближений и предположений. Например, до сих пор не имеет однозначного решения проблема определения разности валентностей переходных металлов в сплавах, поскольку, согласно современным представлениям, переходные металлы в сплавах друг с другом демонстрируют одинаковую валентность [5], что в соответствии с классическими правилами должно при-

вести к нулевому ОЭС в таких сплавах. Кроме того, рассеивающий потенциал в сплаве определяется не только величиной заряда, вносимого примесным ионом в электрически нейтральную ячейку металл-растворителя, но и деформацией решетки вследствие внедрения в матрицу-растворитель примесного иона. Учет обоих факторов, формирующих рассеивающий потенциал в сплавах, возможно в рамках современных *ab initio* методов расчетов, применяемых при вычислениях зонных спектров сплавов. Но непосредственное проведение расчетов ОЭС в рамках этих методов требует дополнительных предположений, а именно отождествления времени релаксации одноэлектронного уровня и транспортного времени [6,7]. При описании многополосных процессов необходимо также дополнительно ввести параметры транспортного времени для каждого из возможных процессов рассеяния, что увеличивает число параметров теории и практически перечеркивает все достоинства *ab initio* методов. Сопоставление полученных результатов расчетов и экспери-

ментальных данных становится крайне сложным, а проследить какие-либо общие тенденции и закономерности практически невозможно. Поэтому классические методы анализа ОЭС разбавленных сплавов переходных металлов, несмотря на использование традиционных и достаточно общих модельных приближений, представляются в данном плане наиболее последовательными и корректными.

Ранее нами была предложена простая методика расчета ОЭС разбавленных сплавов переходных металлов, основанная на решении кинетического уравнения с учетом двухполосного характера рассеяния электронов проводимости в разбавленных сплавах переходных металлов без использования ограничений на интенсивность взаимодействия носителей заряда с кулоновскими полями ионов сплава [8]. Одним из наиболее важных качественных результатов, полученных на основе выполненных расчетов ОЭС разбавленных сплавов с участием ряда переходных металлов (V, Nb, Ta, Mo и W), стала возможность расположения всех перечисленных металлов на общей шкале относительной электроотрицательности избыточного заряда. Введение этой шкалы позволило определить относительный избыточный заряд, вносимый примесным ионом в матрицу-растворитель, и рассчитать прирост ОЭС на один процент примеси для всех известных сплавов на основе перечисленных переходных металлов. Однако выполненные расчеты не распространялись на сплавы металлов платино-родиевой группы, что в известной мере ограничивает универсальность предложенной нами методики. Поэтому представляется целесообразным расширить спектр исследуемых сплавов и проанализировать ОЭС разбавленных сплавов с участием всех немагнитных металлов переходного ряда.

2. Модель и метод расчета

Согласно двухполосной модели проводимости Мотта, перенос заряда в переходных металлах и их сплавах осуществляется наиболее подвижными s -электронами, которые, помимо рассеяния внутри полосы, рассеиваются и в частично заполненную d -полосу с вероятностью прямо пропорциональной плотности состояний (ПС) принимающей полосы на уровне Ферми. Так как в переходных металлах ПС d -электронов во много раз больше ПС s -электронов, то вследствие большей вероятности именно механизм рассеяния с переходом s -электронов в d -полосу является доминирующим. Несмотря на наличие второго канала проводимости, сопротивление не уменьшается по отношению к сопротивлению «нормальных» металлов с одной полосой проводимости, а растет из-за частичного выключения s -электронов из

процесса переноса заряда благодаря их переходам в d -полосу, а «тяжелые» d -электроны в нем вообще не участвуют. Экспериментальная обоснованность применения двухполосной модели проводимости Мотта для анализа электросопротивления переходных металлов и их сплавов при высоких и низких температурах подтверждается наличием корреляции значений электросопротивления и величин ПС d -электронов металла-растворителя на уровне Ферми [9–11]. Аналогичная корреляция значений ОЭС и величины ПС матрицы-растворителя существует для разбавленных сплавов переходных металлов [8].

Гамильтониан, описывающий внутри- и межполосные переходы электронов проводимости без переворота спина в результате их рассеяния на кулоновских полях случайным образом распределенных по узлам кристаллической решетки ионов сплава, в сплаве типа замещения A_xB_{1-x} , имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_l E_l a_l^+ a_l + \frac{1}{N} \sum_{n,l,l'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{r}_n)} B_{l,l'}(n) a_l^+ a_{l'} \quad (1)$$

где E_l — энергия электрона с квантовым числом l , которое включает индекс полосы проводимости j ($j = s, d$) и волновой вектор \mathbf{k} ; \mathbf{r}_n — радиус-вектор узла кристаллической решетки с номером n ; $B_{l,l'}(n)$ — конфигурационно-зависящая (рассеивающая) часть гамильтониана (1):

$$B_{l,l'}(n) = v(n)[\lambda_{ll'} \delta_{j,j'} + \lambda_{ll'}(1 - \delta_{j,j'})] \quad (2)$$

В квадратных скобках с помощью δ -символа в явном виде выделены диагональные и недиагональные слагаемые по индексу полосы. Коэффициент $v(n) = \alpha_B(n)c_A - \alpha_A(n)c_B$ описывает хаотическое распределение ионов компонентов сплава по узлам кристаллической решетки, c_A и c_B — концентрации растворителя и примеси, $\alpha_{A(B)}(n) = 1$, если ион типа А(В) находится в узле n , и нулю в другом случае. Матричные элементы $\lambda_{ll'}$ характеризуют интенсивности внутриволосного ($j = j'$) и межволосного ($j \neq j'$) рассеяния:

$$\lambda_{ll'} = \frac{1}{\Omega_0} \int d\mathbf{r} \psi_l^* \Delta U(\mathbf{r}) \psi_{l'} \quad (3)$$

где ψ_l — волновая функция металла-растворителя, Ω_0 — объем элементарной ячейки и $\Delta U(\mathbf{r}) = U^A(\mathbf{r}) - U^B(\mathbf{r})$ — разность средних энергий компонентов сплава, $U^A(\mathbf{r})$ — средняя энергия компонента А.

В системах с участием переходных металлов полосы проводимости, выходящие на уровень Ферми, гибридизуются. Гибридизация приводит к перенормировке «основного» состояния электронов, что,

однако, не является причиной появления дополнительного механизма рассеяния электронов проводимости. Так, начальные s - и d -состояния электронов перенормируются и появляются новые гибридные s - и d -подобные состояния. В дальнейшем будут использоваться данные о ПС переходных металлов, полученные на основании *ab initio* зонных расчетов, выполненных с учетом эффектов гибридизации, и для простоты будем считать эти эффекты учтенными в периодической части гамильтониана (1), а для s - и d -подобных полос проводимости сохраним принятые ранее обозначения.

Решение кинетического уравнения в случае малой концентрации примеси в рамках двухполосной модели проводимости в одноэлектронном и одноузельном приближениях с учетом только линейных по внешнему электрическому полю \mathbf{F} поправок может быть получено без использования дополнительного ограничения на величину интенсивности взаимодействия электронов проводимости с рассеивателем [8]. В результате для неравновесной добавки $f_{\mathbf{k}j}$ к фермиевской функции распределения $f_{\mathbf{k}j}^0$ в первом порядке разложения по концентрации примеси находим

$$f_{\mathbf{k}j} = e\hbar(\mathbf{F}, \mathbf{v}_{\mathbf{k}j}) \times \left[\frac{I_{\mathbf{k}j'j'} + J_{\mathbf{k}j'j} + L_{\mathbf{k}jj'}}{(I_{\mathbf{k}jj} + J_{\mathbf{k}jj'}) (I_{\mathbf{k}j'j'} + J_{\mathbf{k}j'j}) - L_{\mathbf{k}jj'} L_{\mathbf{k}j'j}} \right] \frac{\partial f_{\mathbf{k}j}^0}{\partial E_{\mathbf{k}j}}, \quad (4)$$

где $j \neq j'$, $\mathbf{v}_{\mathbf{k}j}$ — скорость электрона с волновым вектором \mathbf{k} в полосе проводимости j . Наличие индекса j' в правой части выражения (4) говорит о том, что рассеяние электронов происходит в двух «неизолированных» полосах проводимости. Отметим, что недиагональные по квантовым индексам поправки к равновесной функции распределения появятся лишь при учете высших приближений по концентрации [12]. Интегралы в (4) имеют вид

$$\begin{aligned} I_{\mathbf{k}jj} &= c \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' \delta(E_{\mathbf{k}j} - E_{\mathbf{k}'j}) |T_{\mathbf{k}j, \mathbf{k}'j}|^2 \times \\ &\quad \times (1 - \cos(\mathbf{v}_{\mathbf{k}j}, \mathbf{v}_{\mathbf{k}'j})), \\ J_{\mathbf{k}jj'} &= c \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' \delta(E_{\mathbf{k}j} - E_{\mathbf{k}'j'}) |T_{\mathbf{k}j, \mathbf{k}'j'}|^2, \\ L_{\mathbf{k}jj'} &= -c \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' \delta(E_{\mathbf{k}j} - E_{\mathbf{k}'j'}) |T_{\mathbf{k}j, \mathbf{k}'j'}|^2 \times \\ &\quad \times \left| \frac{\mathbf{v}_{\mathbf{k}'j'}}{\mathbf{v}_{\mathbf{k}j}} \right| \cos(\mathbf{v}_{\mathbf{k}j}, \mathbf{v}_{\mathbf{k}'j'}), \end{aligned} \quad (5)$$

где $|T_{ll'}|^2$ — квадрат модуля недиагонального элемента T -матрицы рассеяния. Интеграл $I_{\mathbf{k}jj}$ описы-

вает рассеяние электрона с переходом внутри полосы j (приход и уход), интеграл $J_{\mathbf{k}jj'}$ — межполосное рассеяние с уходом электрона из полосы j в полосу j' и интеграл $L_{\mathbf{k}jj'}$ описывает межполосное рассеяние с приходом электрона из полосы j' в полосу j .

Для упругого рассеяния электронов проводимости легко выполнить усреднение матричных элементов λ_{ll} и $\lambda_{ll'}$ по углу между векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}' , тогда матричные элементы становятся константами, зависящими только от индекса полосы [8]. В результате T -матрицу рассеяния находим как сумму геометрической прогрессии матриц:

$$[T] = [B][[I] - [F][B]]^{-1}, \quad (6)$$

где

$$[F] = \begin{bmatrix} F_s & 0 \\ 0 & F_d \end{bmatrix}, [B] = \begin{bmatrix} \lambda_{ss} & \lambda_{sd} \\ \lambda_{ds} & \lambda_{dd} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$[I]$ — единичная матрица, а

$$F_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{z - E_{\mathbf{k}j}} \quad (8)$$

— функция Грина электрона проводимости в полосе j .

В общем случае для проводимости разбавленного бинарного сплава немагнитных переходных металлов с учетом проводимости по двум полосам получаем:

$$\begin{aligned} \sigma &= 2e^2 \hbar \sum_j n_j \frac{I_{j'j'} + J_{j'j} + L_{jj'}}{(I_{jj} + J_{jj'}) (I_{j'j'} + J_{j'j}) - L_{jj'} L_{j'j}} \times \\ &\quad \times (v_{xj})^2 \frac{\partial f_j^0}{\partial E_j}, \end{aligned} \quad (9)$$

где $j \neq j'$, n_j — концентрация электронов на уровне Ферми в j -полосе металла-растворителя.

Последнее выражение является «правилом сложения» для проводимостей двух параллельно включенных «неизолированных» (зонных) полос проводимости и существенно отличается от обычно используемого правила для сложения проводимостей параллельно включенных «изолированных» зон [2] наличием вкладов, соответствующих «приходу» электронов в полосу проводимости — $L_{jj'}$. В случае равенства этих вкладов нулю формула (9) переходит в классическое определение для суммы проводимостей параллельно включенных изолированных проводников.

Далее, следуя модельным предположениям Мотта о том, что d -полоса является ловушкой для подвижных s -электронов и о полном выключении d -электронов из процесса переноса заряда, учиты-

вая, что $g_d(E_F) \gg g_s(E_F)$, для s -электронов проводимости со сферической поверхностью Ферми получаем:

$$\sigma_s = 2 \frac{e^2 \hbar}{3} n_s v_s^2 g_s(E_F) \frac{1}{J_{sd}}. \quad (10)$$

И, наконец, положив $|T_{sd}|^2 \approx |B_{sd}|^2$, получим классический результат модели Мотта для электросопротивления в приближении слабого взаимодействия:

$$\rho \sim J_{sd} \sim g_d(E_F)/g_s(E_F) |B_{sd}|^2. \quad (11)$$

Рассеивающий потенциал для электронов проводимости в простейшем случае может быть выбран в виде экранировочного потенциала Томаса – Ферми:

$$U(r) = \left(\frac{e\Delta Z}{\epsilon_0 \Omega_0} \right) \frac{e^{-qr}}{r^2}, \quad (12)$$

ΔZ – величина относительного избыточного заряда, вносимого примесным ионом в матрицу-растворитель, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума [5], q – обратный радиус экранирования [13].

В этом приближении для оценки величины интенсивности рассеяния, полагая интенсивности $s \rightarrow d$ и $d \rightarrow d$ рассеяния электрона близкими по величине ($\lambda_{sd} \approx \lambda_{dd} = \lambda$), в силу их пропорциональности ПС «принимавшей» полосы, находим:

$$\lambda = \left(\frac{e^2 \Delta Z}{\epsilon_0 \Omega_0} \right) \frac{1}{q \sqrt{4k_F^2 + q^2}}. \quad (13)$$

Окончательно для ОЭС в двухполосной модели проводимости получаем:

$$\rho = c \frac{6\pi m}{e^2 \hbar n_s E_F} \frac{g_d(E_F)}{g_s(E_F)} \left| \frac{\lambda}{1 - F_d \lambda} \right|^2, \quad (14)$$

где F_d – функция Грина электрона в d -полосе, вычисленная на волновых функциях металла-растворителя. Множитель E_F/m входит в знаменатель выражения (14) вследствие аппроксимации квадрата скорости в формуле (9) с помощью квадратичного закона дисперсии. Величину радиуса экранирования можно приближенно считать равной обратному ковалентному радиусу [13,14].

Отличие формулы (14) от выражения, полученного в приближении слабого взаимодействия электрона проводимости с кулоновскими полями ионов сплава, заключается в наличии знаменателя $|1 - F_d \lambda|$, благодаря которому проявляется зависимость ОЭС как от мнимой, так и от действительной части функции Грина металла-растворителя на уровне Ферми. В отличие от большого числа параметров, характеризующих металл-растворитель,

сорт примеси описывается единственным параметром ΔZ , определяющим относительный избыточный заряд, вносимый этой примесью в матрицу-растворитель.

3. Результаты вычислений и обсуждение

Оценка значения относительного избыточного заряда

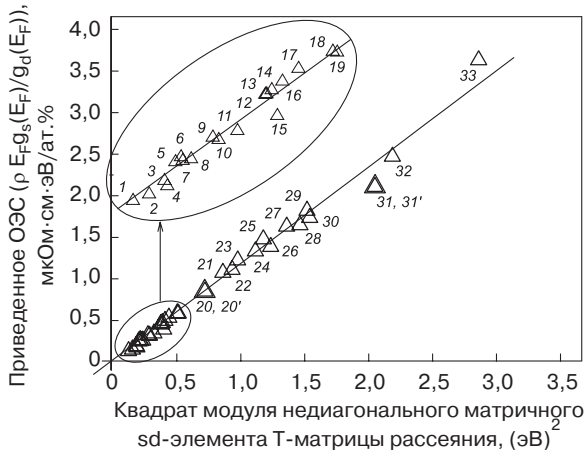
Для оценки значения ΔZ ранее нами была использована методика с применением первопринципных ЛМТО-расчетов энергетических характеристик металлов и сплавов [15]. Расчет проводился с учетом реальной структуры металлов-растворителей. Малость концентрации примеси позволяет пренебречь ее влиянием на волновые функции и плотность состояний металла-растворителя, но следствием внедрения примесного иона является появление в ячейке нескомпенсированного избыточного заряда. Методика ЛМТО-расчетов позволяет легко вычислить изменение заряда вблизи атомов растворителя. Это изменение и дает искомую величину ΔZ .

Вычисление ОЭС и шкала относительного избыточного заряда

Согласно (14), приведенное ОЭС на 1 ат.% примеси в разбавленных сплавах переходных металлов является линейной функцией квадрата модуля недиагонального матричного элемента T -матрицы рассеяния. Сопоставление экспериментальных данных ОЭС разбавленных сплавов с результатами вычислений, выполненных в рамках описанного подхода и совпадающих с результатами *ab initio* расчетов, показывает, что эта закономерность хорошо прослеживается для всех рассмотренных разбавленных сплавов типа замещения (рис. 1).

В табл. 1 приводятся численные результаты вычислений относительного избыточного заряда для различных разбавленных сплавов переходных металлов. Используемые при расчетах параметры зонной структуры металлов-растворителей сведены в табл. 2.

Как было отмечено выше, в отличие от классического правила Линде, относительный избыточный заряд ΔZ в выражении (12), характеризующий рассеяние электрона проводимости на примеси, определяется не только зарядом, вносимым в элементарную ячейку примесным атомом, но и деформационным потенциалом решетки, создаваемым внедренными примесными атомами. Прямая корреляция значений ОЭС с относительным изменением параметра решетки ($1/a$) (da/dc) [16], где a – параметр решетки, прослеживается в сплавах изоэлектронных металлов между собой (V и Nb, Mo и W, Ir



Растворитель–примесь
 1 - Nb-Pt 6 - Pd-Pt 11 - Mo-W 16 - Pt-Mo 20' - Ta-W 25 - Nb-Ir 30 - Mo-Nb
 2 - Ir-Rh 7 - Nb-Ta 12 - Nb-V 17 - Pt-V 21 - Nb-Mo 26 - Mo-V 31 - W-Nb
 3 - Rh-Ir 8 - Ta-Nb 13 - Pt-Rh 18 - Ta-Mo 22 - V-Nb 27 - V-Ta 31' - W-Ta
 4 - W-Mo 9 - Pt-Ir 14 - Pt-Nb 19 - Rh-Pd 23 - Nb-W 28 - Mo-Ta 32 - Mo-Pd
 5 - Pd-Rh 10 - Rh-Pt 15 - Pt-Pd 20 - Ta-V 24 - V-W 29 - V-Mo 33 - Nb-Pd

Рис. 1. Зависимость значений приведенного ОЭС от квадрата модуля недиагонального матричного *sd*-элемента *T*-матрицы рассеяния.

и Rh, Pt и Pd). Для сплавов неизоэлектронных металлов выявить подобные корреляции не всегда возможно.

Сопоставление взаимного расположения переходных металлов на общей шкале относительного избыточного заряда дает возможность объединить все рассмотренные элементы в единую схему (рис. 2). Использование этой схемы позволяет с точностью до 10–15% оценить значение избыточного заряда, вносимого примесью в матрицу-растворитель, для любой интересующей пары переходных металлов.

Штрих-пунктирными линиями соединены металлы, для которых полученные величины относительного избыточного заряда не вполне укладываются в приведенную схему. Возможными причинами таких выпадений экспериментальных результатов из общей схемы могут послужить недостаточная чистота образцов в сплавах на основе ванадия (V–W и V–Mo) или использование данных, полученных вблизи точки сверхпроводящего перехода в случае системы Nb–Ir.

Принятое обозначение $A-|\Delta Z|\rightarrow B$ показывает, что 1% примеси элемента А привносит в раствори-

Таблица 1. Вычисленные значения относительного избыточного заряда.

Примесь	Металл-растворитель								
	V	Nb	Mo	Rh	Pd	Ta	W	Ir	Pt
V	—	-0,111	-0,167			-0,179			-0,287
Nb	0,111	—	-0,175			-0,081	-0,217		-0,243
Mo	0,167	0,175	—			-0,118	-0,084		-0,26
Rh				—	-0,156			-0,097	-0,29
Pd		0,438	0,265	0,156	—				-0,093
Ta	0,179	0,081	0,118			—	-0,167		
W	0,129	0,217	0,084			0,167	—		
Ir		0,19		0,097				—	-0,206
Pt		0,056		0,29	0,093				—

Таблица 2. Параметры металлов-растворителей, использовавшиеся в вычислениях: E_F — энергия Ферми; $g_d(E_F)$ — плотность состояний *d*-электронов на уровне Ферми (результаты *ab initio* расчета [15]); r_{kov} — обратный ковалентный радиус [13]; $Re(G)$, $Im(G)$ — реальная и мнимая части функции Грина.

Параметр	V	Nb	Mo	Rh	Pd	Ta	W	Ir	Pt
E_F , эВ	10,36	9,22	10,95	9,57	7,57	9,73	12,35	9,83	8,88
$g_d(E_F)$, с/эВ·атом	1,64	1,65	0,59	1,21	2,44	1,61	0,55	0,84	1,74
r_{kov} , нм ⁻¹	12,5	13,7	14,5	13,5	13,1	13,8	14,6	13,7	12,8
$Re(G)$, эВ ⁻¹	0,17	0,77	-0,5	1,73	2,86	0,8	0,05	2,43	3,17
$Im(G)$, эВ ⁻¹	-5,15	-5,18	-1,85	-3,62	-4,41	-5,05	-1,72	-3,53	-4,13

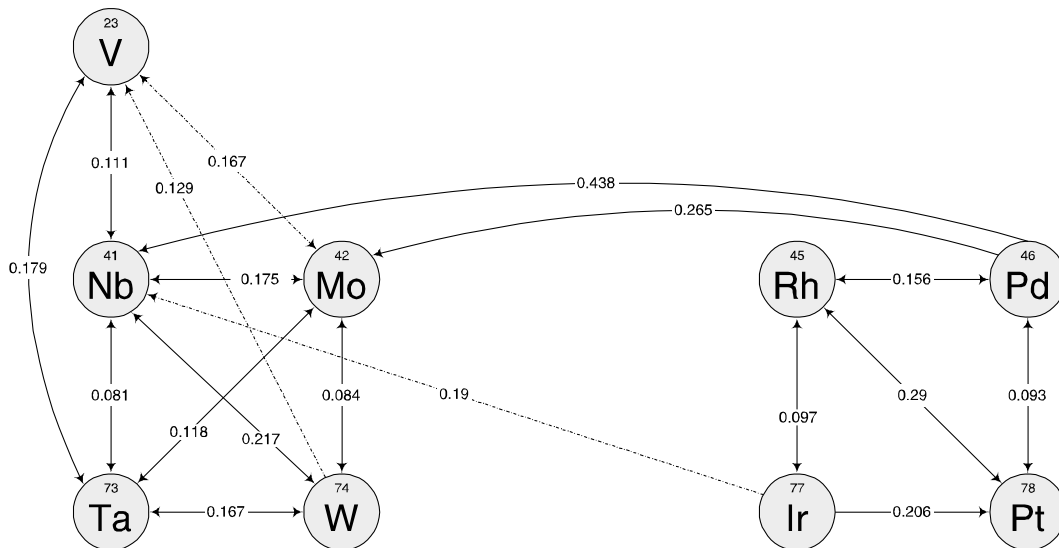


Рис. 2. Схема электроотрицательности переходных металлов по шкале избыточного заряда.

тель В относительный избыточный заряд с абсолютным значением $|\Delta Z|$. Выбор знака ΔZ зависит от взаимного расположения растворителя и примеси: если примесный элемент расположен ниже и (или) правее элемента растворителя, то следует выбрать знак «+», в другом случае выбираем «-».

Близость значений избыточных зарядов, приносимых элементами VI ряда периодической системы в элементы VIII ряда и наоборот — Nb–Ta, Rh–Ir, ..., подтверждает наличие «деформационного» эффекта одного порядка у изоэлектронных переходных металлов. Также близки по значению и «электронные» вклады, связанные с различием чисел заполнения электронных оболочек компонентов сплава (Nb–Mo, Ta–W, Rh–Pd).

В работе [8] нами установлены свойства относительного избыточного заряда, такие как антисимметричность относительно замены местами компонентов сплава $\Delta Z_{A-B} = -\Delta Z_{B-A}$ и аддитивность $\Delta Z_{A-B} = \Delta Z_{C-B} - \Delta Z_{C-A}$.

Для сплавов V, Nb, Mo, Ta и W с металлами платино-родиевой группы (Rh, Pd, Ir, Pt) эти свойства выражены не столь четко. Причина этого в том, что, во-первых, металлы платино-родиевой группы имеют решетку ГЦК-типа, в отличие от ОЦК-решетки V, Nb, Mo, Ta и W. Во-вторых, эти группы металлов разделены так называемой «рениевой» аномалией и имеют плохую взаимную растворимость. Кинетические свойства таких сплавов существенно зависят от способа их приготовления, в частности, образование кластеров и различных дефектов сильно сказывается на величине ОЭС сплава.

Обобщая полученные результаты, можно заключить, что правило аддитивности относительного избыточного заряда практически строго выполняется

для сплавов переходных металлов одной группы с хорошей взаимной растворимостью. В этом случае относительный избыточный заряд является следствием деформационного потенциала для металлов, расположенных на рис. 2 по «вертикали» (V, Nb, Ta), или только избыточного заряда для расположенных по «горизонтали» (Nb, Mo, Rh, Pd).

4. Заключение

В результате расчетов, проведенных даже при достаточно грубых предположениях в рамках двухполосной модели проводимости, с достаточной степенью точности (10–15%) показано выполнение хорошо известного правила о пропорциональности значений остаточного электросопротивления квадрату модуля недиагонального матричного sd -элемента T -матрицы рассеяния практически для всех немагнитных разбавленных сплавов $3d$ – $5d$ ОЦК и ГЦК переходных металлов. Ранее эта закономерность была экспериментально установлена лишь для сплавов с участием непереходных металлов. Выполненный же нами расчет демонстрирует, как распространяется общность этого правила на большую группу разбавленных сплавов переходных металлов, и насколько критичным для них оказывается двухполосный характер проводимости. Характерно, что во всех рассмотренных случаях матричный элемент рассеяния определяется не только мнимой, но и действительной частью функции Грина матрицы-растворителя, что обусловлено значительной величиной интенсивности взаимодействия электронов с рассеивателями. Влияние сорта примесного иона на величину остаточного сопротивления определяется лишь значением относительного

избыточного заряда, вносимого им в матрицу-растворитель. Введенная нами простая схема систематизации металлов-компонентов сплавов на основе шкалы относительного избыточного заряда позволяет приближенно оценить значение остаточного электросопротивления сплавов, которое появится при введении 1% той или иной примеси в любую матрицу переходного металла.

Работа выполнена по государственному контракту № 02.435.11.2019 от 30.09.2005 г. при поддержке программы Президиума РАН «Квантовая макрофизика», грантов РФФИ №04-02-16464, №05-02-08169 — офи-а и научной школы НШ-5869.2006.2.

1. J.M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **B109**, 1892 (1958).
2. Дж. Займан, *Электроны и фононы*, Изд-во иностран. лит., Москва (1962).
3. J. Friedel, *Can. J. Phys.* **34**, 1190 (1956).
4. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1974).
5. У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел*, т. 1, Мир, Москва (1983).
6. W.H. Butler, *Phys. Rev.* **B31**, 3260 (1985).
7. I. Mertig, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 237 (1999).
8. Yu.Yu. Tsiovkin, A.N. Voloshinskii, V.V. Gapontsev, and V.V. Ustinov, *Phys. Rev.* **B71**, 184206 (2005).
9. А.Н. Волошинский, Л.Ф. Савицкая, *ФММ* **35**, 451 (1973).
10. А.Н. Волошинский, Ю.Ю. Циовкин, Н.В. Рыжанова и др., *ФММ* **68**, 629 (1989).
11. В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирхин, *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты*

в d- и f-металлах и их соединениях, УрО РАН, Екатеринбург (2004).

12. L. Van Hove, *Physica* **21**, 517 (1955).
13. И.В. Мартынов, В.А. Кондратьев, В.И. Фетисов, *ДАН* **292**, 635 (1987).
14. В.В. Скорчеллетти, *Теоретическая электрохимия*, Изд-во химической лит., Ленинград (1959).
15. W. Kohn and L.J. Sham, *Phys. Rev.* **B140**, A1133 (1965); O.K. Andersen, *Phys. Rev.* **B12**, 3060 (1975); R.O. Jones and O. Gunnarsson, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 681 (1989); Programs TB-LMTO-ASA 47 package.
16. А.Е. Вол, *Строение и свойства двойных металлических систем*, Физматгиз, Москва (1959).

Theory of residual electrical resistivity for dilute alloys of nonmagnetic 3d–5d transition metals

Yu.Yu. Tsiovkin, A.N. Voloshinskii,
V.V. Gapontsev, and V.V. Ustinov

The residual electrical resistivity values for dilute alloys of nonmagnetic transition metals were calculated using the kinetic equation method with account for the two-band conductivity model in the approximation of low impurity concentration. It is shown that for all nonmagnetic dilute binary substitutional alloys of transition metals the reduced residual electrical resistivity is a linear function of the squared nondiagonal element of the scattering T -matrix modulus.

Keywords: kinetic equation, electric resistance, dilute alloy.