

PACS numbers: 63.20.dh, 63.20.dk, 63.20.kd, 63.20.kg, 72.15.Lh, 72.15.-v

Теорія взаємодії фононів з електронами в металах

С. М. Січкач

**Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

Представлено *ab initio* розрахунки для ГЦП-металів: матричного елемента електрон-фононої взаємодії, функції Еліашберга та анізотропії транспортної функції для напрямків $[10\bar{1}0]$ і $[0001]$. Теорія враховує реальну форму кристалічного потенціалу та його повну варіацію при збуренні, що викликане наявністю фонону у ґратниці. Такий підхід уможливило вийти за межі класичного наближення жорсткого зсуву йонів і врахувати анізотропію фізичних властивостей для кристалів з некубічною симетрією.

Ab initio calculations for h.c.p. metals are presented for the matrix element of electron–phonon interaction, Eliashberg function, and anisotropy of the transport function for the $[10\bar{1}0]$ and $[0001]$ directions. The theory takes into account the real shape of the crystal potential and its total variation due to excitation, which is caused by the presence of a phonon in the lattice. This approach allows going beyond the classical approach of the rigid-ions' approximation and permits to take into account the anisotropy of the physical properties of crystals with non-cubic symmetry.

Представляются *ab initio* расчёты для ГПУ-металлов: матричного элемента электрон-фононного взаимодействия, функции Елиашберга и анизотропии транспортной функции для направлений $[10\bar{1}0]$ и $[0001]$. Теория учитывает реальную форму кристаллического потенциала и его полную вариацию при возбуждении, которое вызвано наличием фонона в решётке. Такой подход позволяет выйти за пределы классического приближения жёсткого смещения ионов и учесть анизотропию физических свойств для кристаллов с некубической симметрией.

Ключові слова: функція Еліашберга, питомий електроопір, ГЦП-кристали, повнопотенціальна лінійна метода «маффін-тін»-орбіталей (ПП ЛМТО), мікроконтактні спектри, анізотропія.

Keywords: Eliashberg function, resistivity, h.c.p. crystals, full-potential lin-

ear ‘muffin-tin’ orbital (FP-LMTO) method, microcontact spectra, anisotropy.

Ключевые слова: функция Елиашберга, удельное электросопротивление, ГПУ-кристаллы, полнопотенциальный линейный метод «маффин-тин»-орбиталей (ПП ЛМТО), микроконтактные спектры, анизотропия.

(Отримано 3 серпня 2016 р., остаточний варіант — 22 лютого 2017 р.)

1. ВСТУП

Добре відомо, що електрон-фононна взаємодія (ЕФВ) визначає ряд важливих фізичних властивостей металів. Електричний та тепловий опір, надпровідність, пом'якшення фононних мод, перенормування низькотемпературної електронної складової теплоємності ($\propto T$) та ряд інших фізичних явищ можуть бути коректно проінтерпретовані, виходячи зі знання спектральної функції розподілу електрон-фононної взаємодії в кожній конкретній речовині. *Ab initio* розрахунок останньої є найбільш прийнятний з фізичної точки зору, оскільки дозволяє уникнути різних штучних апроксимацій, характерних для феноменологічних моделей. Більш того, розрахунки з перших принципів у випадку, коли «фізика» процесу може бути обумовлена різними механізмами, дозволяють одержати правильну картину явища. Наприклад, детальний мікроскопічний розрахунок електрон-фононної взаємодії істотно полегшує з'ясування механізмів виникнення надпровідної фази. Наявність останньої може бути пригнічена, наприклад, через сильні спінові флюктуації, що має місце у Sc та Y (див. розділи 5 та 6), або таке пригнічення зумовлено, в іншому прикладі, зміщенням піків функції Еліашберга до області низької густини фононів [1]). В якості інших прикладів можна навести механізм пом'якшення фононних мод, структурний фазовий перехід та аномалії фононного спектра. Ці явища можуть бути пояснені як сильною взаємодією електронів з «аномальною» фононою гілкою (а це може бути з'ясовано тільки в результаті детального розрахунку), так і характерним для даного матеріалу сильним ангармонізмом, або наявністю домішок та різних дефектів у кристалі [2].

Даний огляд є безумовно повним в сенсі математичної аналізи можливостей розрахунку матричного елементу електрон-фононної взаємодії, якщо ми знаходимось у парадигмі лінійних розрахунків зонних структур. Дійсно, ми маємо всього дві можливості, які докладно розглянуто й порівняно у цій роботі.

Варіант 1. Ми робимо тільки самоузгоджений розрахунок електронної структури, потім чисельно одержуємо градієнт самоузгодженого внутрішньокристалічного потенціалу і використовуємо

цю інформацію для розрахунку матричного елемента у методі «жорсткого зсуву іонів». У розділі 3 детально аналізуються найкращі результати, раніше одержані саме цією методою. Логічним і кінцевим розвитком цієї методи є інший варіант.

Варіант 2. Він полягає в одержанні повної математичної формули для матричного елемента при урахуванні повної варіації внутрішньокристалічного потенціалу (а не тільки його жорсткої градієнтної частини). Теорію подано в розділі 4, а чисельні розрахунки автора — у розділах 5–8. Отже, якщо стисло, ми аналізуємо всі можливості розрахунку матричного елемента та для кожної такої можливості додаємо найкращі (в сенсі — найнадійніші) результати комп'ютерних розрахунків.

2. КЛЮЧОВІ ДЕФІНІЦІЇ

Розрахунок електрон-фононої взаємодії в кінцевому підсумку зводиться до обліку всіх можливих процесів обміну енергією між системою електронів з фононами. Звичайно, в даному випадку мова йде про віртуальні фонони, які можуть бути збуджені у твердому тілі. В результаті ЕФВ змінюється енергія E_p^0 і виникає затухання Γ_p електронів. Зазначимо, що електрони розглядаються як квазічастинки, і представляють собою фермі-систему (концепція фермі-рідини Ландау):

$$\begin{aligned} E_p &= E_p^0 + \text{Re} \Sigma(p, E_p + i\Gamma_p), \\ \Gamma_p &= \text{Im} \Sigma(p, E_p + i\Gamma_p), \end{aligned} \quad (1)$$

де p — імпульс електрона, Σ — незвідна власне енергетична частина Грінової функції електронів, в якій і враховуються всі можливі шляхи обміну. Можливість цілком коректного розрахунку Σ стала очевидна після роботи Мігдала [3], в якій було показано, що поправки до нульового члену мають порядки $(m/M)^{1/2} \sim 10^{-2}$ (m, M — маси електрона та йона, відповідно), і тому ними можна знехтувати.

З рівняння (1) виходить, що в результаті ЕФВ має змінюватися стан електронів поблизу поверхні Фермі:

$$\begin{aligned} v_p &= \partial E_p / \partial p = \partial E_p^0 / \partial p + (\partial \text{Re} \Sigma / \partial E_p) \partial E_p / \partial p, \\ v_p &= v_{p,0} + (\partial \text{Re} \Sigma / \partial E_p) v_p, \end{aligned} \quad (2)$$

або, позначаючи усереднений параметр ЕВФ через $\lambda = -\partial \text{Re} \Sigma / \partial E$, одержуємо

$$v_p = v_0 / (1 + \lambda) \quad (3)$$

і відповідно

$$m = m_0(1 + \lambda), \quad (4)$$

де v_0 і m_0 — швидкість і маса електронів у відсутність ЕФВ, а v і m — ті ж величини за наявності ЕФВ. Можна говорити про перенормування стану електронів в результаті ЕФВ, ввівши коефіцієнт перенормування:

$$Z = 1 + \lambda. \quad (5)$$

Тоді

$$v_p = v_0/Z, \quad m = m_0Z. \quad (6)$$

З іншого боку, наведені розрахунки Пранга і Каданова [4] показали, що в результаті ЕФВ не змінюються: енергія Фермі, аномальний скін-ефект, пов'язана зі спинами магнетна сприйнятливості, всі гальвано-магнето-термічні коефіцієнти, довжина вільного пробігу електронів і коефіцієнти перенесення, ядерна спінгратницева релаксація, частота ефекту де Гааза-ван Альфена.

Зі співвідношення (2) випливає, що перенормування електронних станів в результаті ЕФВ визначається параметром λ . Очевидно, що в кінцевому підсумку λ має бути виражений через параметри електрон-йонної взаємодії та спектр коливань ґратниці металу [5]:

$$\lambda = 2 \int g(\omega) \omega^{-1} d\omega, \quad (7)$$

$$g(\omega) = \sum_v \int_S d^2 p \int_{S'} d^2 p' \frac{|\mathcal{N}_{pp'v}|^2}{2\pi^3 v_F} \delta(\omega - \omega_{p-p',v}) / \int_S d^2 p, \quad (8)$$

v_F — швидкість фермі-електронів. Інтеграли по p і p' беруться по Фермі-поверхні S . Вони враховують всі можливі переходи електронів з початкового стану $|\mathbf{p}\rangle$ у кінцеве $|\mathbf{p}'\rangle$. Ці переходи здійснюються через збудження поля фононів. $\mathcal{N}_{pp'v}$ — матричний елемент електрон-фононної взаємодії, v — поляризації гілок фононного спектру, за якими проводиться підсумовування. Після роботи Скалапіно і Андерсена [6], в літературі, спектральну функцію електрон-фононної взаємодії $g(\omega)$ (або, коротше, функцію Еліашберґа) часто представляють у вигляді:

$$g(\omega) \equiv \alpha^2(\omega)F(\omega) \equiv \alpha^2 F(\omega), \quad (9)$$

де

$$F(\omega) = N_{\text{phon}}^{-1} \sum_{\nu} \int (2\pi)^{-3} d^3\mathbf{q} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q},\nu}) \quad (10)$$

— густина станів спектру коливань ґратниці, N_{phon} — загальне число фонових станів.

Величину $F(\omega)$ можна розрахувати, наприклад, за дисперсійними кривими для спектру коливань ґратниці, що зазвичай визначається нейтронографічним способом. Множник функції ЕВФ $\alpha^2(\omega) \cong \alpha^2 F(\omega)/F(\omega)$ можна визначити при порівнянні відповідних співвідношень (8)–(10); зручність від подібного вираження $g(\omega)$ пов'язана з тим, що, як виявилось, $\alpha^2(\omega)$ більш плавно змінюється з енергією, ніж $F(\omega)$ і відповідно співвідношення (9) зайвий раз підкреслює, що зміна $g(\omega)$ в першу чергу пов'язана з $F(\omega)$.

Функція Еліашберга може бути виражена через розширення фонових ліній $\gamma_{\mathbf{q}\nu}$, та має вигляд [5]:

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{2\pi N(\varepsilon_F)} \sum_{\mathbf{q}\nu} \frac{\gamma_{\mathbf{q}\nu}}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}\nu}), \quad (11)$$

де $N(\varepsilon_F)$ — густина електронних станів, у розрахунку на один атом і спин, на рівні Фермі ε_F .

Розширення ліній характеризують часткові внески кожного фонона:

$$\gamma_{\mathbf{q}\nu} = 2\pi\omega_{\mathbf{q}\nu} \sum_{kjj'} \left| \mathcal{N}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j',kj}^{\mathbf{q}\nu} \right|^2 \delta(\varepsilon_{kj} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j'} - \varepsilon_F). \quad (12)$$

Константа електрон-фонових взаємодій також може бути визначена в термінах розширення фонових ліній:

$$\lambda = \sum_{\mathbf{q}\nu} \frac{\gamma_{\mathbf{q}\nu}}{\pi N(\varepsilon_F) \omega_{\mathbf{q}\nu}^2}. \quad (13)$$

У чистих металах (за винятком області дуже низьких температур) електрон-фонові взаємодії є домінуючим фактором для виникнення електричного опору речовини. Використання найнижчого порядку варіаційного наближення (lowest-order variational approximation—LOVA) розв'язку для Больцманового рівняння [7] дає наступну формулу для температурної залежності:

$$\rho_I(T) = \frac{\pi V_{\text{cell}} k_B T}{N(\varepsilon_F) \langle v_I^2 \rangle} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \frac{\xi^2}{\sinh^2 \xi} \alpha_{tr}^2 F(\omega), \quad (14)$$

де нижній індекс I вказує напрямок електричного струму. У цій роботі було досліджено два напрямки: $[0001]$ (c -вісь або напрям z) і $[10\bar{1}0]$ (a -вісь або x -напрямок). $\langle v_I^2 \rangle$ є усереднений квадрат ком-

поненти I швидкості Фермі, $\xi = \omega/2k_B T$, V_{cell} — об'єм елементарної комірки.

Математично, транспортна функція електрон-фононої взаємодії $\alpha_{tr}^2 F(\omega)$ з рівняння (14) відрізняється від функції Еліашберґа $\alpha^2 F(\omega)$ лише додатковим фактором $[1 - v_I(\mathbf{k})v_I(\mathbf{k}')/\langle v_I^2 \rangle]$ у підінтегральному виразі (8), який переважно підсилює процеси зворотного розсіяння.

Формула (14) залишається в силі приблизно в діапазоні $\Theta_{tr}/5 < T < 2\Theta_{tr}$ [8], де:

$$\Theta_{tr} \equiv \langle \omega^2 \rangle_{tr}^{1/2}, \quad (15)$$

$$\langle \omega^2 \rangle_{tr} = \frac{2}{\lambda_{tr}} \int_0^{\infty} \omega \alpha_{tr}^2 F(\omega) d\omega, \quad (16)$$

$$\lambda_{tr} = 2 \int_0^{\infty} \omega^{-1} \alpha_{tr}^2 F(\omega) d\omega. \quad (17)$$

Зазначимо, що низькотемпературний електричний опір є результатом електрон-електронної взаємодії, розмірних ефектів, розсіяння на домішках тощо. З іншої сторони, при високих температурах потрібно обов'язково брати до уваги ефекти ангармонізму і температурне «розмиття» поверхні Фермі.

Як зауважив Макміллан [9], формули (7) та (8) значно спрощуються у припущенні сферичної поверхні Фермі та локального наближення для матричного елемента (залежність тільки від $|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|$). При цьому $\omega g(\omega)$ зовсім не залежить від енергії фононів (див. співвідношення (8)):

$$\int_0^{\infty} \omega g(\omega) d\omega = N(\varepsilon_F) h \langle \aleph_{el}^2 \rangle / 2M, \quad (18)$$

де M — маса атома, $\langle \aleph_{el}^2 \rangle$ — усереднений по поверхні Фермі квадрат електронного матричного елемента (який по суті є $\langle \aleph_{pp'v}^2 \rangle$ без множника, що залежить тільки від ω , $\aleph_{pp'v}(\omega)^2 = \aleph_{el}^2 \times \aleph_{phon}(\omega)$). При використанні співвідношення (18) можна одержати для λ наближений вираз:

$$\lambda = N(\varepsilon_F) \langle I^2 \rangle / M \langle \omega^2 \rangle = \eta / M \langle \omega^2 \rangle. \quad (19)$$

При цьому використовується наступна апроксимація:

$$\langle \omega^2 \rangle = \frac{\int \omega F(\omega) d\omega}{\int \omega^{-1} F(\omega) d\omega} \cong \frac{\int \omega g(\omega) d\omega}{\int \omega^{-1} g(\omega) d\omega}, \quad (20)$$

де η — параметр Хопфілда [10], який повністю визначається електронною зонною структурою речовини. Зазвичай він розраховується у наближенні моделю жорсткого зсуву йонів [5], тобто фактично при знаходженні матричного елемента у (8) оператор збурення мав вигляд суми з доданків типу $\nabla V_{eff}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$, де \mathbf{R}_n — радіус-вектор положення центру йона у елементарній комірці з номером n . (Якщо розрахункова схема передбачає розділення кристалічного простору на маффін-тін-сфери, як це має місце, наприклад, у методі ЛМТО, то кажуть про наближення жорсткого МТ-зсуву.)

Для ізотропних металів з великою густиною станів на поверхні Фермі це наближення в багатьох випадках в цілому справедливо, так як через сильне екранування зміна потенціалу відбувається лише поблизу зміщеного йона. Втім і в перехідних металах, які багато в чому задовольняють цьому критерію, наближення жорсткого зсуву йона виявляється в ряді випадків незадовільним [11]. Наприклад, в рамках цього наближення не описується анізотропія перенормування електронної маси в ГЦК-Nb. Звичайно це більше відхилення можна очікувати для анізотропних металів, наприклад з ГЦП-ґратницею. Саме такі метали [12] і будуть об'єктом дослідження в цьому огляді. Але перш ніж ми перейдемо до результатів розрахунків, що виходять за обмеження моделю жорсткого зсуву йонів, зробимо ретроспективну аналізу існуючих до теперішнього дня результатів розрахунків електронної і ЕФВ систем.

3. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ВИМІРЮВАННЯ І МОДЕЛЬНІ РОЗРАХУНКИ

3.1. Рутеній і технецій

Зонну структуру Ru та Tc обчислено Йепсоном зі співавторами в роботі [13] методом ЛМТО з урахуванням релятивістських ефектів. Авторами показано, що при збільшенні атомного номеру всередині розглянутого періоду (при переході від цирконію до рутенію) відносна енергетична відстань між центрами d - та s -зон зменшується. Це відбувається за рахунок все більш зростаючого від'ємного ефективного потенціалу, що діє на d -електрони. При збільшенні атомного номера збільшується енергія зв'язку d -електронів та звужуються d -зони.

Енергетичне розподілення густини електронних станів в рутенії вельми близьке до того, що має місце у технеції. Електрони s -симетрії локалізовані біля дна валентної зони, що характерно для усіх перехідних металів. При порівнянні енергетичного розподілу електронів p -, d -, f -симетрії в валентній зоні рутенію помітно, що d -

f -гібридизація електронних станів виражена сильніше ніж p - d -гібридизація, оскільки форма енергетичного розподілу електронів p -симетрії відрізняється від розподілу електронів d - і f -симетрії. Найбільші відмінності спостерігаються біля рівня Фермі.

Як зазначено у [13], теоретично обчислені поверхні Фермі і рутенію і осмію виявилися у відмінній кількісній згоді з результатами вимірювань ефекту де Гааза–ван Альфена. Це вказувало на те, що розрахована позиція d -зони мала похибку менш ніж у 10 mRy.

В роботі [14] одержано дисперсійні гілки та густина електронних станів ГЦП-технецію методом ККР. В розрахунку використовувались три різні наближення до обмінно-кореляційного внеску в кристалічний потенціал: повний обмін за Слетером ($\alpha = 1$), обмінно-кореляційний Оверхаузерів $V_{\text{ex}}(r) = -2,07[\rho(r)]^{0,3}$ та обмінно-кореляційний потенціал Хедіна–Лунквіста [15]. Ширина заповненої частини валентної зони виявилась найменшою при використанні повного Слетерова обміну. При урахуванні ефектів кореляції ширина зони збільшувалась.

У роботі Санборна зі співавторами [16] було розраховано густину електронних станів на поверхні Фермі $N(\varepsilon_F)$ і тензор плазмових частот Друде

$$(\Omega_p^2)_{\alpha\beta} = 4\pi e^2 N(\varepsilon_F) \langle v_\alpha v_\beta \rangle \quad (21)$$

для 14 простих металевих елементів із ГЦП-ґратницею. Використовуючи експериментальні дані електричному опору у вищезгаданих монокристалах для напрямків ρ_\perp і ρ_\parallel (напрямок струму лежить, відповідно, перпендикулярно і в базисній площині кристалу), що зібрані у роботі Басса [17], були одержані електрон-фононні транспортні константи зв'язку λ_{tr} . Одержані значення λ_{tr} порівнювалися з λ , що були вилучені з експериментальних значень температури переходу у надпровідний стан, для десяти надпровідних елементів. Також було одержано нову інформацію про електрон-фононний зв'язок для чотирьох елементів, які не мають надпровідних властивостей. Розглянемо ситуацію більш докладно.

Питомий електричний опір ρ кристалічного металу пов'язаний із квазічастинковою транспортною швидкістю розсіяння $1/\tau$ матеріалу і плазмовою частотою Друде Ω_p співвідношенням

$$\rho = 4\pi/\Omega_p^2 \tau. \quad (22)$$

У формулі (22) не враховано залишковий опір, що виникає через присутність домішок у чистому кристалі.

Для некубічних металів, провідність σ є тензором другого рангу,

$$\sigma_{\alpha\beta} = \partial j_\alpha / \partial E_\beta = (\Omega_p^2 \tau)_{\alpha\beta} / 4\pi, \quad (23)$$

відповідно Ω_p^2 є також тензором другого рангу в цьому випадку і визначається співвідношенням

$$(\Omega_p^2) \equiv \frac{4\pi e^2}{V_{cell}} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\alpha} v_{\mathbf{k}\beta} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F) \equiv 4\pi e^2 N(\varepsilon_F) \langle v_{\mathbf{k}\alpha} v_{\mathbf{k}\beta} \rangle, \quad (24)$$

де $v_{\mathbf{k}\alpha}$ є групова швидкість електронів, яка дорівнює $\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}/\partial(\hbar k_{\alpha})$ (див. (2)) і для спрощення запису ми маємо на увазі, що k_{α} є скороченням для α компоненти хвильового вектора \mathbf{k}_{α} і зонного індексу j . Властивості симетрії ГЦП-структури вимагають, щоб σ і Ω_p^2 були діагональними в Декартові системі координат, коли вісь z збігається з віссю c кристалу. Тому τ повинне мати вигляд діагонального тензора другого рангу в цій базисі:

$$(1/\tau)_{\alpha\alpha} = (\Omega_p^2)_{\alpha\alpha} \rho_{\alpha\alpha} / 4\pi. \quad (25)$$

Нарешті $1/\tau$ може бути пов'язано з електрон-фононим параметром зв'язку для транспортних властивостей λ_{tr} , через високо-температурний розклад [7] у найнижчому порядку варіаційного розв'язування Больцманового рівняння (LOVA):

$$\hbar/\tau_{\alpha\alpha} = 2\pi\lambda_{\alpha\alpha, tr} k_B T (1 - \hbar^2 \langle \omega^2 \rangle_{tr} / 12k_B^2 T^2 + \dots), \quad (26)$$

де $\langle \omega^2 \rangle_{tr}$ є середньоквадратичною транспортною частотою фононів металу (16), для якої використовувалось наближення:

$$\langle \omega^2 \rangle_{tr} = \frac{\int \omega g_{tr}(\omega) d\omega}{\int \omega^{-1} g_{tr}(\omega) d\omega} \cong \frac{\int \omega F(\omega) d\omega}{\int \omega^{-1} F(\omega) d\omega} = \langle \omega^2 \rangle. \quad (27)$$

Константа електрон-фононного перенормування маси λ , яка також визначає температуру переходу зі звичайного у надпровідний стан, тісно пов'язана з λ_{tr} . Однак вони не обов'язково рівні, і вивчення їх відносних величин було однією із цілей [16]. Підхід у цій роботі полягав у розрахунку Ω_p за допомогою зонної теорії та подальшого об'єднання цього результату з експериментальним значенням для ρ відповідно до формул (25) і (26), щоб одержати емпіричні значення для λ_{tr} . Якщо метал є надпровідним, це значення може бути порівняно із величиною λ , яка одержана з експериментальних значень для T_c , у відповідності з рівнянням Макміллана [9],

$$T_c = \frac{\Theta_D}{1,45} \exp \left[-\frac{1,04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^* (1 + 0,62\lambda)} \right], \quad (28)$$

де Θ_D — Дебайова температура, μ^* — псевдопотенціал Кулонового

екранування. Інший шлях для визначення λ може бути знайдений у експерименті по встановленню коефіцієнта електронної теплоємності:

$$\gamma_{el} = (\pi k_B)^2 (1 + \lambda_\gamma) N(\varepsilon_F) / 3, \quad (29)$$

Tc і Ru є надпровідниками, зі значеннями $T_c = 7,8$ К і $T_c = 0,5$ К, відповідно. Значення λ_{tr} виявилось більше ніж значення константи λ , що були одержані з рівняння Макміллана. Для рутенію експериментальні значення електроопору демонструють анізотропію $\rho_{zz}/\rho_{xx} \approx 0,7$, в той час, як λ_{tr} видається, більш ізотропною $\lambda_{tr,zz}/\lambda_{tr,xx} \approx 0,9$. Значна частина анізотропії ρ враховується через анізотропію у Ω_p . Для Ru і Os, λ_γ більше, λ_{tr} , в той час як для Tc, λ_γ і λ_{tr} майже співпадають.

Параметр Хопфілда η для Tc розраховувався за допомогою несамоузгоджених значень енергетичних рівнів, одержаних у роботі Асокамани і Якутти [18], а також методом ППХ з X_α -апроксимацією ($\alpha = 0,70299$) для обмінно-кореляційного потенціалу у роботі Чаттерджи [19]. Останній розрахунок дає $\lambda \approx 0,60-0,87$, що краще узгоджується зі значенням 0,68 із розрахунку Гілермета [20], ніж емпіричне $\lambda_{tr} = 0,99$ [16]. Однак значення Чаттерджи для $N(\varepsilon_F)$ не узгоджуються з даними [16] та результатами Благи зі співавторами [21]. Отже, для технецію потрібен надійний розрахунок константи електрон-фононої взаємодії з перших принципів.

3.2. Скандій і ітрій

Зонна структура та форма поверхні Фермі скандію обчислювалась методом комірок Альтманом та Брендлі [22] і методом ППХ Флемінгом та Луксом [23]. Зонні структури обчислені методом комірок та ППХ-методом відрізнялися одна від іншої. Як зазначено у роботі [23] це пов'язано з різними кристалічними потенціалами, що використовувались у розрахунках. Рівень Фермі скандію припадає на максимум густини станів. Аналізуючи парціальні густини станів, автори [23] зробили висновок, що у скандію спостерігається $p-d$ -гібридизація електронних станів. В той же час максимум парціальної густини s -станів знаходиться нижче дна d -зони і $s-d$ -гібридизація виражена досить слабо. Густина електронів s -симетрії на рівні Фермі незначна.

Прямі мірювання поверхні Фермі для Sc за допомогою ефекту де Газа-ван Альфена було виконано Шірбером зі співавторами [24].

Ітрій є металом, ізоелектронним скандію, що пояснює близькість їх електронних структур. Розрахунки зонної структури та поверхні Фермі Y виконав Лукс [25], а також Альтман та Бредлі [22]. Лукс використовував методу нерелятивістських приєднаних

пласких хвиль. У розкладанні кристалічної хвильової функції було взято 22 базові функції. Кристалічний потенціал конструювався у 250 точках $1/24$ Бріллюєнової зони, що дозволило побудувати гістограми густини електронних станів з кроком $0,01Ry$ (це, до речі, було визначним досягненням для 1966 р.). Альтман і Бредлі застосували у розрахунку модифіковану методику комірок. Одержана ними повна густина станів ітрію дещо відрізнялась від тієї, що одержав Лукс. Як показано у [25], ці розбіжності зумовлені різними способами побудови кристалічного потенціалу. Альтман і Бредлі [22] представили кристалічний потенціал у вигляді суперпозиції потенціалів йонів Y^{+3} і потенціалу, зумовленого однорідним розподілом зарядової густини трьох електронів, а Лукс [25] застосував при визначенні потенціалу схему Маттхейса [26].

Рівень Фермі у елементів третьої групи приходить на максимум як загальної, так і парціальних густин станів за виключенням s -станів, густина яких на рівні Фермі незначна.

Відомо, що чистий ітрії не зазнає магнетного упорядкування навіть при дуже низьких температурах. Тим не менш у розчинених сплавах ітрію з незначними домішками важких рідкоземельних металів ($\approx 1\%$), наприклад з гадолінієм, виникає гелікоїдальна хвиля спінової густини. Вочевидь, статистично розподілені по ґратниці атоми рідкоземельних металів, що мають власний магнетний момент у такій малій кількості повинні тільки підлаштовуватися під деяку хвилю, що виникає внаслідок нестійкості у системі валентних електронів ітрію. У роботі [27] теоретично досліджена топологія поверхні Фермі ітрію лінійною методою ККР. Встановлено, що поверхня Фермі має конґруентні ділянки. Причому вектор, який сполучає ці конґруентні ділянки, $k' = 0,58\pi/c$, де c — постійна ГЦП-ґратниці, практично співпадає з вектором гелікоїдальної хвилі спінової густини $k' = 0,54\pi/c$, що виникає у розбавленому стопі ітрію з гадолінієм. У цій же роботі розвинута теорія антиферомагнетного упорядкування у сплавах ітрію з важкими рідкоземельними металами, що ґрунтується на нестійкості парамагнетного стану ітрію відносно утворення хвилі спінової густини у присутності локальних моментів $4f$ -електронів рідкоземельних металів. Ці локальні моменти ініціюють виникнення хвилі спінової густини і підлаштовують свої проєкції під неї. В рамках цієї теорії вдалося побудувати магнетні фазові діаграми стопів ітрії-тербій та ітрії-гадоліній.

Sc і Y мають найвищі значення густини станів на рівні Фермі, та найвищий усереднений електроопір $\langle\rho\rangle = 1/3\rho_{zz} + 2/3\rho_{xx}$ серед усіх досліджених матеріалів з ГЦП-структурою, і зовсім не мають яких-небудь ознак надпровідності при атмосферному тиску. Вважається [28], що це може бути результатом тривало існуючих

спінових флюктуацій, які пригнічують утворення Куперових пар. Магнетна сприйнятливість Sc і Y також сильно збільшена (порівняно з іншими елементами з нульовою температурою переходу у надпровідний стан) і змінюється майже по закону Кюрі коли T зменшується [29]. Ці зауваження відносяться в рівній мірі до Pd, і тому прийнято вважати [28], що спінові флюктуації найбільш важливі на обох кінцях періоду перехідних металів, де конверсійне співвідношення, наприклад, між T_c і γ_{el} порушується. Питомий опір для Sc і Y має звичайну Больцманнову температурну залежність, у всякому разі до 300 K, і дає [16] досить великі значення λ_{tr} (0,51 і 0,62 для Sc і Y відповідно). Зазначимо, що ці значення більше навіть чим у Pd.

Таким чином, скандій та ітрій мають бути надпровідниками і T_c була би не нижче ніж 2 K, якщо б спінові флюктуації не пригнічували надпровідність.

4. ЕЛЕКТРОН-ФОНОННИЙ МАТРИЧНИЙ ЕЛЕМЕНТ

Центральною проблемою при розрахунку електрон-фононної взаємодії є оцінювання змін в електронному Гамільтоніані спричинених атомовими зміщеннями. Як правило, це вимагає знання повного низькоенергетичного спектру збудження металу: квазічастинкових електронних енергій і частот фононів. Розрахунки коливальних властивостей, в принципі, можливі в рамках методу функціоналу густини (як це показано у [12]). Пошук квазічастинкових збуджень спектрів, з іншого боку, набагато більш важке завдання теорії багатьох тіл. Надалі всюди працює припущення, що енергії квазічастинок обов'язково апроксимуються енергетичними зонами, розрахованими у рамках теорії функціоналу густини.

У рамках функціоналу густини за методом лінійного відгуку задача обчислення фононних спектрів та електрон-фононної взаємодії зводиться до знаходження першого порядку змін до одноелектронних хвильових функцій, густини заряду і ефективного потенціалу індукованих наявністю фононної моди $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ з заданим хвильовим вектором \mathbf{q} [30]

Як видно з формули (8), потрібно розрахувати електрон-фононний матричний елемент $S_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j',kj}^{\mathbf{q}\nu}$, який зазвичай записують у вигляді:

$$S_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j',kj}^{\mathbf{q}\nu} = \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}j' | \delta^{\mathbf{q}\nu} V | \mathbf{k}j \rangle, \quad (30)$$

де обидва стани $\psi_{\mathbf{k}j}$ та $\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j'}$ мають енергії Фермі ε_F і де зміна внутрішньокристалічного потенціалу V перетворюється з Декартової системи до системи, пов'язаної з власними векторами $\eta_{\mathbf{q}\nu}(R_{\mu})$ пев-

ної фононної моди $\mathbf{q}\nu$:

$$\delta^{qv}V = \sum_{R,\mu} \frac{\eta_{qv}(R_\mu)}{(M_R \omega_{qv})^{1/2}} \frac{\delta V}{\delta R_\mu}, \quad (31)$$

де M_R є маса ядра атому \mathbf{R} .

На перший погляд це не зовсім очевидно, але вираз (30) для $\mathcal{N}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}^j, \mathbf{k}j}^{qv}$ має бути виправлений з урахуванням неповноти набору базисних функцій для тих систем розрахунку, що використовують фіксований кінцевий набір функцій (орбіталей) по яким розкладаються хвильові функції реальної системи. Така ситуація має місце, наприклад для методи ЛМТО. Щоб переконатися в цьому, потрібно повторити стандартне квантово-механічне виведення «золотого правила Фермі» для хвильових функцій, представлених через базис ЛМТО. [8] Виведення розглядає швидкість розсіювання для переходів з початкового незбуреного стану в кінцевий збурений стан на момент часу t . Для ілюстрації візьмемо Гамільтоніян H та збурення ΔV . Для спрощення позначимо початковий стан як $\psi_s(t)$, а кінцевий стан позначимо через $\tilde{\psi}_r(t)$. Швидкість розсіювання дається інтегралом перекриття у квадраті:

$$P_{rs}(t) = |\langle \tilde{\psi}_r(t) | \psi_s(t) \rangle|^2. \quad (32)$$

У нестационарному формулюванні одержуємо наступне рівняння для Гамільтоніяну:

$$i \frac{\partial \psi_s(t)}{\partial t} = H \psi_s(t) \quad (33)$$

та

$$i \frac{\partial \tilde{\psi}_r(t)}{\partial t} = (H + \Delta V) \tilde{\psi}_r(t). \quad (34)$$

При використанні варіаційного оцінювання для хвильової функції, як це робиться в методі ЛМТО [12],

$$\psi_s(t) = \sum_{\alpha} \chi_{\alpha} A_{\alpha}^s(t). \quad (35)$$

Рівняння (33) запишеться як

$$i \sum_{\alpha} \langle \chi_{\beta} | \chi_{\alpha} \rangle \frac{\partial A_{\alpha}^s(t)}{\partial t} = \sum_{\alpha} \langle \chi_{\beta} | H | \chi_{\alpha} \rangle A_{\alpha}^s(t) \quad (36)$$

або у матричному запису

$$i\hat{\mathbf{O}} \frac{\partial A^s(t)}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}} A^s(t) \quad (37)$$

де матриця перекриття $O_{\beta\alpha} = \langle \chi_\beta | \chi_\alpha \rangle$, а матриця Гамільтоніану $H_{\beta\alpha} = \langle \chi_\beta | H | \chi_\alpha \rangle$. Використовуючи стандартну заміну $A^s(t) = \exp(-i\varepsilon_s t) A_s$, рівняння (37) трансформується у стандартне матричне рівняння для проблеми пошуку власних значень $\hat{\mathbf{H}} : \hat{\mathbf{H}} A^s = \varepsilon_s \hat{\mathbf{O}} A^s$ вирішення якого дає найкращу (у варіаційній сенсі) оцінку для власних функцій оператора $\hat{\mathbf{H}}$ при заданому базисі $\{\chi_\alpha\}$.

Задля кращої варіаційної оцінки для збуреної хвильової функції $\tilde{\psi}_r(t)$ у першому порядку слід врахувати зміни коефіцієнтів розкладання ΔA^r і базису $\Delta \chi_\alpha$, як це видно з варіації рівняння (35). Зберігаючи лише внески лінійного порядку, інтеграл перекриття між початковим і кінцевим станом набуває вигляду

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\psi}_r(t) | \psi_s(t) \rangle &= \delta_{rs} + \langle A^r(t) | \Delta \hat{\mathbf{O}} | A^s(t) \rangle + \\ &+ \langle \Delta A^r(t) | \hat{\mathbf{O}} | A^s(t) \rangle, \end{aligned} \quad (38)$$

де $\Delta A^r(t)$ можна знайти з рішення рівняння, одержаного після лінеаризації (34) або варіації (36), тобто

$$i\Delta \hat{\mathbf{O}} \frac{\partial A^r(t)}{\partial t} + i\hat{\mathbf{O}} \frac{\partial \Delta A^r(t)}{\partial t} = \Delta \hat{\mathbf{H}} A^r(t) + \hat{\mathbf{H}} \Delta A^r(t) \quad (39)$$

або у еквівалентному вигляді

$$i\hat{\mathbf{O}} \frac{\partial \Delta A^r(t)}{\partial t} = (\Delta \hat{\mathbf{H}} - \varepsilon_r \Delta \hat{\mathbf{O}}) A^r(t) + \hat{\mathbf{H}} \Delta A^r(t), \quad (40)$$

де зміни Гамільтоніану та матриці перекриття містять терміни, пов'язані зі зміною базисних функцій, тобто

$$\begin{aligned} \Delta O_{\beta\alpha} &= \langle \Delta \chi_\beta | \chi_\alpha \rangle + \langle \chi_\beta | \Delta \chi_\alpha \rangle, \\ \Delta H_{\beta\alpha} &= \langle \chi_\beta | \Delta V | \chi_\alpha \rangle + \langle \Delta \chi_\beta | H | \chi_\alpha \rangle + \langle \chi_\beta | H | \Delta \chi_\alpha \rangle. \end{aligned} \quad (41)$$

Задля розв'язання рівняння (40) використовується заміна

$$\Delta A^r(t) = e^{-i\hat{\mathbf{O}}^{-1}\hat{\mathbf{H}}t} \Delta B^r(t). \quad (42)$$

Для коефіцієнтів $\Delta B^r(t)$ одержуємо розв'язок

$$\Delta B^r(t) = -i \int_a^t e^{-i\hat{\mathbf{O}}^{-1}\hat{\mathbf{H}}\tau} \hat{\mathbf{O}}^{-1} (\Delta \hat{\mathbf{H}} - \varepsilon_r \Delta \hat{\mathbf{O}}) A^r(\tau) d\tau \quad (43)$$

і матричний елемент (38) можна переписати таким чином:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Psi}_r(t) | \Psi_s(t) \rangle = & \delta_{rs} + \langle A^r | \Delta \hat{\mathbf{O}} | A^s \rangle e^{i(\varepsilon_r - \varepsilon_s)t} - \\ & - i \int_a^t \langle A^r | \Delta \hat{\mathbf{H}} - \varepsilon_s \Delta \hat{\mathbf{O}} | A^s \rangle e^{i(\varepsilon_r - \varepsilon_s)\tau} d\tau. \end{aligned} \quad (44)$$

У руслі звичайної практики, зроблено припущення, що збурення включається адіабатично. В момент часу $t = -\infty$, $a \rightarrow -\infty$ у рівнянні (44). Для швидкості розсіяння в одиницю часу одержимо вираз

$$w_{rs} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} P_{rs}(T) \Big|_{T \rightarrow \infty} = 2\pi \delta(\varepsilon_r - \varepsilon_s) \left| \langle A^r | \Delta \hat{\mathbf{H}} - \varepsilon_r \Delta \hat{\mathbf{O}} | A^s \rangle \right|^2. \quad (45)$$

Як можна бачити, ця формула відрізняється від відомого виразу для w_{rs} наявністю вкладів, пов'язаних із зміною базисних функцій, як впливає з визначення (41).

Тепер потрібно відновити початкові позначення. Електрон-фононний матричний елемент $\langle A^r | \Delta \hat{\mathbf{H}} - \varepsilon_r \Delta \hat{\mathbf{O}} | A^s \rangle$ повинен описувати розсіяння електронів на поверхні Фермі зі стану $|\mathbf{k}j\rangle$ в стан $|\mathbf{k} + \mathbf{q}j'\rangle$ через фононну пертурбацію $\delta^{qv}V$. В цьому випадку $\{r\} \equiv \{\mathbf{k} + \mathbf{q}j'\}$, $\{s\} \equiv \{\mathbf{k}j\}$ і використовуючи визначення (41), одержуємо:

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j',\mathbf{k}j}^{qv} = & \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}j' | \delta^{qv} V_{eff} | \mathbf{k}j \rangle + \left\langle \sum_{\alpha} \delta^{qv} \chi_{\alpha}^{\mathbf{k}-\mathbf{q}} A_{\alpha}^{\mathbf{k}+\mathbf{q}j'} | H - \varepsilon_{\mathbf{k}j} | \mathbf{k}j \right\rangle + \\ & + \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}j' | H - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j'} | \sum_{\alpha} \delta^{qv} \chi_{\alpha}^{\mathbf{k}} A_{\alpha}^{\mathbf{k}j} \rangle, \end{aligned} \quad (46)$$

де $\delta^{qv} \chi_{\alpha}^{\mathbf{k}}$ – позначає варіацію МТ-базисних функцій в результаті присутності фононної моди $\mathbf{q}v$. Треба звернути увагу, що $\delta^{qv} \chi_{\alpha}^{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ хвиля Блоха з вектором \mathbf{k} , так як тільки він дає ненульовий внесок в інтеграл з $\Psi_{\mathbf{k}j}$. Останні два додатки в (46) представляють собою виправлення неповноти базисних функцій, які зникають якщо $\Psi_{\mathbf{k}j}$ і $\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}j'}$ є точними (а не варіаційними) розв'язками.

Матричні елементи електрон-фононної взаємодії для всіх металів розраховано скалярно-релятивістською лінійною методом МТ-орбіталей (ЛМТО) з урахуванням реальної повної форми кристалічного потенціалу (ПП ЛМТО). Інтегрування у \mathbf{k} -просторі, необхідне для знаходження матричних елементів, виконано на 50 точках у незвідній частині Бріллуєнної зони. Інші характеристики розрахункової схеми, такі ж, як і у роботі [12].

5. СКАНДІЙ

5.1. Функція Еліашберга й надпровідні властивості

Рисунок 1 подає теоретично розраховану функцію Еліашберга для Sc. Енергетичне положення основних піків цієї функції дуже

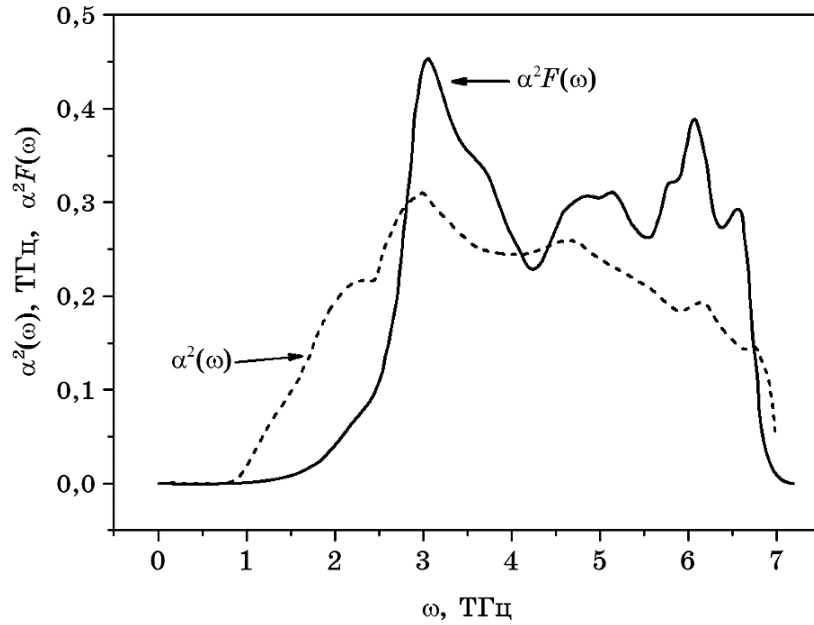


Рис. 1. Функція Еліашберга $\alpha^2 F(\omega)$ та електрон-фононний множник $\alpha^2(\omega)$ для скандію.¹

схожі на відповідні піки в густині фононних станів [12], за винятком незначних відмінностей. Основна відмінність між цими двома функціями полягає в збільшенні інтенсивності низькоенергетичного піка й придушення амплітуди функції Еліашберга для високих енергій. Цей ефект виникає в результаті того, що $\alpha^2(\omega)$ має монотонно спадаючий характер (див. рис. 1) Тому матричний елемент електрон-фононної взаємодії не може бути представлений у вигляді $\alpha^2(\omega) = \text{const}$ і отже, вельми відоме наближення Макміллана [9] не є прийнятним для Sc. Слід зазначити, що, наприклад, в Tc (див. розділ 7) і у Nb та Ta [8], наближення $\alpha^2(\omega) \approx \text{const}$ працює досить добре в переважній частині частотного діапазону і, отже, константу електрон-фононної взаємодії можна розкласти у формі добутку незалежних електронної та фононної частин.

Було розраховано параметр електрон-фононної взаємодії й одержано $\lambda_{\text{calc}} = 0,68$. Дуже мало інформації щодо λ для цього металу є в літературі. Кнапп зі співавторами [31] одержали $\lambda = 0,3$ при порівнянні електронної теплоємності за низьких і за високих температур відповідно. Точність цієї процедури вкрай обмежена відсутністю чіткого поділу між електронною та ґратницевою (а також ангармонічною) теплоємністю за високих температур.

Для розрахунку T_c у даному огляді використовувалась форму-

ла Макміллана (28) в модифікації Алена та Дайнса [32]:

$$T_c = \frac{\omega_{\log}}{1,2} \exp \left[-\frac{1,04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* (1 + 0,62\lambda)} \right], \quad (47)$$

де, ω_{\log} — ефективна логарифмічно усереднена фононна частота, μ^* — псевдопотенціал кулонівського екранування. (Відмінність від класичної формули Макміллана (28) полягає у заміні Дебайової температури на ω_{\log} у множнику перед експонентою.)

Скориставшись формулою Алена–Дайнса (47) для Sc було одержано $T_c = 2,73$ К. Як і у випадку з ітрієм (див. розділ 6) спінові флуктуації придушують виникнення Куперових пар та появу надпровідності.

5.2. Анізотропні властивості електричного питомого опору

За розрахунком одержано $\Theta_{tr} = 205,87$ К для z -напряму і $197,7$ К для x -напряму. Таким чином, температурною робочою областю для рівняння (14) є $205,87/5 = 41,7$ К, $2 \cdot 197,7 = 395,4$ К. Як можна бачити на рис. 2, не існує ніяких істотних відмінностей між транспортними функціями для напрямків струму вздовж c - й a -

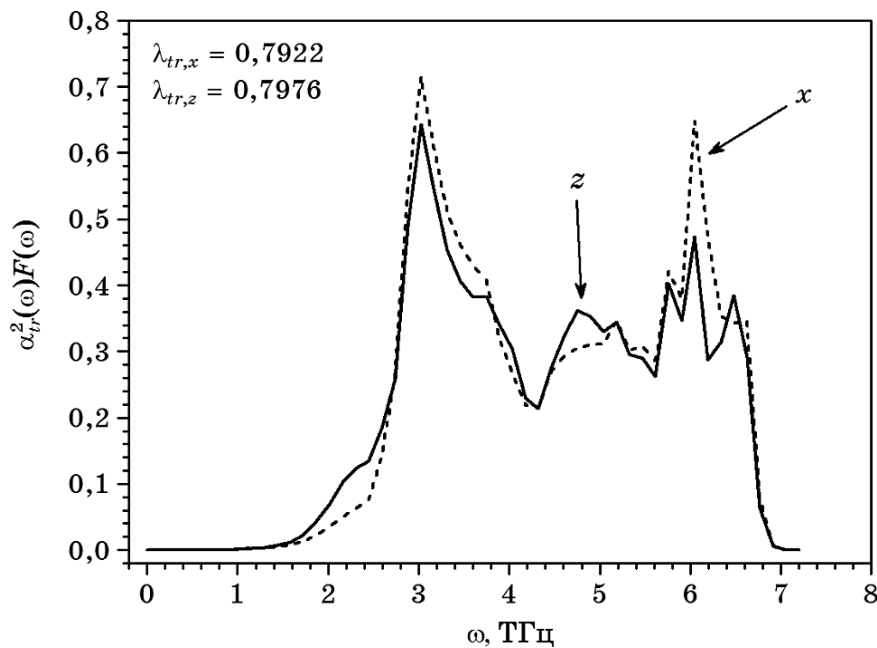


Рис. 2. Анізотропія транспортної функції $\alpha_{tr}^2 F(\omega)$ для Sc. Суцільна та пунктирна лінії відповідають z - та x -напряму відповідно.²

осі. Піки на 3,0 ТГц і 6,05 ТГц мають трішки різні висоти, але ту ж саму форму. Два маленьких піки знайдені в напрямку c -осі на рівні 4,75 і 6,5 ТГц. Було також одержано майже рівні (з урахуванням точности методи розрахунку) значення для транспортних констант електрон-фононої взаємодії $\lambda_{tr} = 0,79$ для обох напрямів. Таким чином, анізотропія електричного опору відповідно до LOVA-наближення в Sc виникає в основному за рахунок різниці між $\langle v_z^2 \rangle$ і $\langle v_x^2 \rangle$. Для $T = 300$ К, був одержаний коефіцієнт анізотропії $\rho_x/\rho_z = 2,53$. Ця величина добре узгоджується з експериментальними співвідношення 2,6, відповідно до роботи Штірмана зі співавторами [33].

Теоретичний розрахунок питомого електричного опору (рис. 3) дає дещо завищені дані у порівнянні з експериментальними точками. Строго кажучи, ця розбіжність менше точності обчислювальної схеми. Проте потрібно брати до уваги два важливі зауваження.

По-перше, це контроверсійна сукупність експериментальних даних, що стосується виміру електричного опору. Наприклад, в обзорі який приводиться у роботі Спедінга [34] зазначено, що багато хто з дослідників дає суперечливі результати. Сам Спедінг

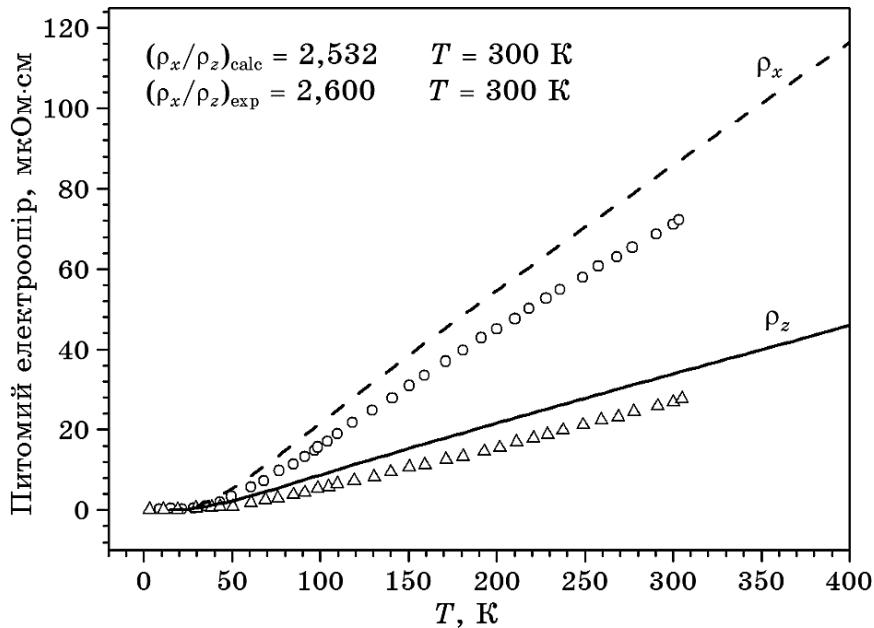


Рис. 3. Анізотропія ґратницевого електричного опору для Sc. Суцільна та пунктирна лінії відображають теоретичні розрахунки для z - та x -напрямків відповідно. Трикутники й кола — експериментальні дані згідно роботи [33] для z - та x -напрямків відповідно.³

одержав коефіцієнт анізотропії 2,2. Це менше, ніж наш результат і експериментальні значення з посилання [33]. Штірман пояснює цю розбіжність різною якістю чистоти в експериментальних зразках монокристалів скандію. Це вірно для області низьких температур де домішки відіграють ключову роль, але, з нашої точки зору, це не може пояснити різні експериментальні результати при 300 К.

По-друге, Больцманнове рівняння є лінійним неоднорідним інтегральним рівнянням з позитивно визначеним самосполученим ядром. Як вже згадувалося раніше, таке рівняння може бути вирішено у варіаційному наближенні. Дуже важливо, що електричний опір є екстремальним значенням (мінімумом) варіаційної функції при одиничному значенні електричного поля [35]. У LOVA-наближенні базис складається лише з однієї функції, яка має найпростіший вигляд $\varphi(k) = -eE v_x(k)\tau$. Очевидно, що якщо розширити базис шляхом збільшення кількості пробних функцій (застосовувати різні корекції LOVA-наближення [36]), можна одержати $\rho \leq \rho_{\text{LOVA}}$. Таким чином, LOVA-наближення дає верхню межу для електричного опору, якщо використовується варіаційна процедура.

У роботі [37] значення електроопору для полікристалу Sc було визначено експериментально для $T = 300$ К, $\rho_{\text{poly_exp}} = (54-70)$ мкОм·см. Використовуючи усереднення за трьома напрямками, $\rho_{\text{poly_cal}}(T) = (2/3\rho_x + 1/3\rho_z)$, можна порівняти наші розрахунки з експериментальними даними для полікристалічного скандію, $\rho_{\text{poly_cal}} = (2/3 \cdot 85,4 \text{ мкОм} \cdot \text{см} + 1/3 \cdot 33,7 \text{ мкОм} \cdot \text{см}) = 68,2 \text{ мкОм} \cdot \text{см}$.

6. ІТРИЙ

6.1. Температура переходу у надпровідний стан

Для константи електрон-фононої взаємодії було одержано наступне розраховане значення, $\lambda_{\text{calc}} = 0,63$. Скориставшись формулою Алена-Дайнса можна оцінити T_c . Оскільки у формулу (47) псевдопотенціал Кулонового екранування μ^* входить у якості параметра, потрібно зробити припущення щодо його значення. У роботі Макміллана [9] для всіх перехідних металів використовувалось $\mu^* = 0,13-0,14$. Діапазон для цієї константи нами було дещо розширено, щоб зрозуміти як буде змінюватися критична температура. Кінцеві результати наведено в табл. 1.

Отже, якщо враховувати тільки електрон-фононний механізм утворення куперівських пар, приходимо до висновку, що T_c має бути приблизно 2 К. Цей результат є теоретичним підтвердженням припущення, яке було зроблено у роботі [16] Таким чином, для Y дійсно працює механізм спін-флюктуаційного пригнічення

ТАБЛИЦЯ 1. Температура переходу у надпровідний стан для Y за різних значень псевдопотенціалу Кулонового екранування.⁴

μ^*	0,10	0,13	0,17
T_c, K	3,32	2,41	1,40

T_c , і цей чинник пояснює відсутність надпровідности у експериментальних роботах.

7. ТЕХНЕЦІЙ

7.1. Функція Еліашберга

На рисунку 4 наведено розраховану функція Еліашберга $\alpha^2 F(\omega)$. Розрахована константа електрон-фононої взаємодії виявилася рівною $\lambda = 0,9039$. Порівнюючи функції $\alpha^2 F(\omega)$ та $F(\omega)$ з [12], добре видно, що яких-небудь суттєвих відмінностей, викликаних інтегруванням по реальній поверхні Фермі та наявністю у підінтегральному виразі матричного елемента електрон-фононої взаємодії, немає. Коефіцієнт $\alpha^2(\omega)$ на всій області інтегрування

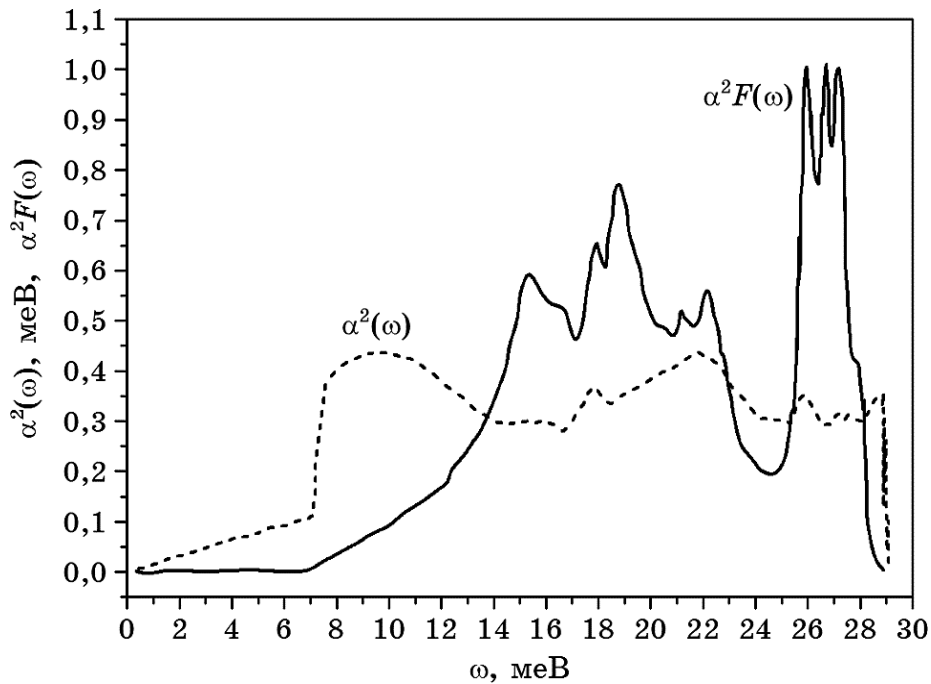


Рис. 4. Функція Еліашберга $\alpha^2 F(\omega)$ та множник $\alpha^2(\omega)$ для T_c .⁵

ТАБЛИЦЯ 2. Параметри електрон-фононої взаємодії у технеції. I — наш розрахунок, II — літературні дані.⁶

Джерело даних	$\langle \omega^2 \rangle^{1/2}$, К	η , ат. од.	λ	T_c , К
I	224,08	0,164	0,9039	8,20
II		0,170 [38]	0,65 [39], 0,78 [38], 0,99 [16]	7,86 [47]

практично постійний (початкова ділянка < 10 меВ не береться до уваги в силу обмеженого набору розрахункових даних в низькоенергетичній області фононного спектру). Невелике збільшення $\alpha^2(\omega)$ в області 22 меВ, а також розширення високоенергетичного піку $\alpha^2(\omega)$ в районі 26–28 меВ можна пояснити більш сильною взаємодією повздовжніх гілок фононного спектра з електронною підсистемою. Оскільки для технецію $\alpha^2(\omega) \approx \text{const}$, слід очікувати, що в цьому випадку буде справедливо відоме наближення Макміллана [9], в рамках якого константу електрон-фононої взаємодії факторизують у вигляді добутку електронної і фононої частин: $\lambda_{MM} = \eta/M \langle \omega^2 \rangle$ (19).

Було одержано (див. табл. 2) $\eta = 0,164$ ат. од., $\langle \omega^2 \rangle^{1/2} = 224,08$ К і, отже, $\lambda_{MM} = 0,9001$. Як видно, це значення λ_{MM} добре збігається з одержаними раніше $\lambda = 0,9039$. Порівняємо тепер розрахований параметр Хопфілда з результатом Батлера [38]. У наближенні жорсткого МТ-зсуву і в рамках методи ККР в роботі [38] одержано $\eta_{KKR} = 0,170$ ат. од. Таким чином, наближення жорсткого МТ-зсуву достатньо добре працює у випадку T_c .

Для фононої частини ситуація виглядає прямо протилежним чином: будь-які спрощувальні припущення щодо фононного спектру призводять до помітного розкиду в значеннях $\langle \omega^2 \rangle$ і, як наслідок, λ . В якості прикладу наведемо кілька значень константи електрон-фононої взаємодії в технеції, які можна зустріти в літературі: 0,65 [39], 0,78 [38], 0,99 [16]. Іншими словами, розрахунок фононного спектра з перших принципів є необхідною і достатньою умовою одержання адекватної картини фізичних процесів, в основі яких лежить електрон-фононна взаємодія.

7.2. Мікроконтактні спектри

На рисунку 5 наведено експериментальну функцію електрон-фононої взаємодії $G_{pe}(\omega)$, що одержана за допомогою методи мікроконтактної (МК) спектроскопії [40]. Теоретичний вид останньої відрізняється від $\alpha^2 F(\omega)$ тільки наявністю додаткового фактора $K(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ [40] у вираженні (8), який визначає геометрію мікроконтакту і умови протікання струму. Передбачається, що

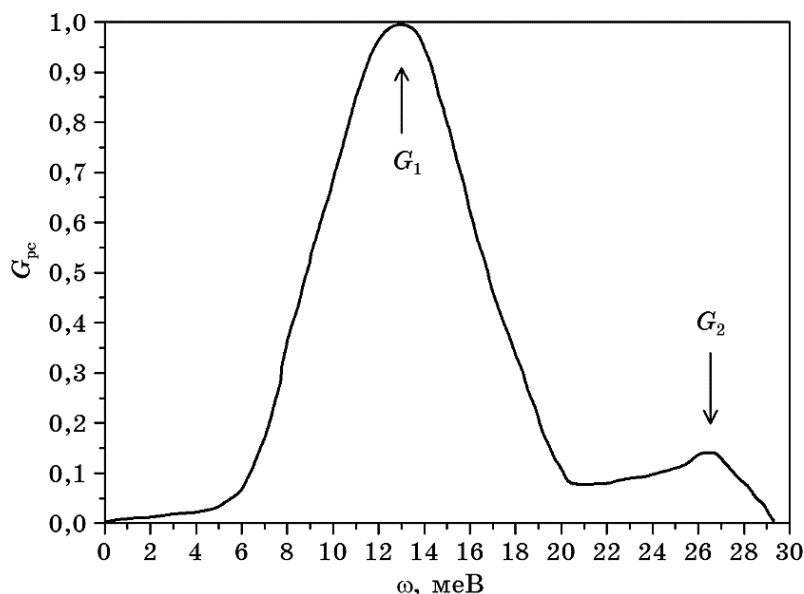


Рис. 5. Експериментальна мікроконтактна функція $G_{pc}(\omega)$ електрон-фонноної взаємодії у технеції [40].⁷

$K(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ не може істотно змінити структуру особливостей, що мають місце в $\alpha^2 F(\omega)$. Таким чином, $G_{pc}(\omega)$ повинна бути близька до $\alpha^2 F(\omega)$. Тим не менше для технецію в області > 18 меВ ці функції істотно різні. В експерименті відсутні піки 19 меВ, 22,5 меВ і сильно пригнічений пік 27 меВ. Настільки помітне «обрізання» високоенергетичної області в $G_{pc}(\omega)$ фактично могло б означати майже повне пригнічення взаємодії електронної підсистеми з високоенергетичними фононами (у тому числі повздовжніми акустичними і оптичними). Якщо б це було дійсно так, то технецій не виявляв би будь-яких надпровідних властивостей.

Потрібно відзначити, що в багатьох МК-спектрах спостерігається значно менше відношення інтенсивностей високоенергетичного піка (G_2) до низькоенергетичного (G_1) в порівнянні з експериментальними нейтронними спектрами фононів. Це пояснюється розігрівом контакту струмом і пов'язаним з ним розширенням спектральних ліній [41], а також значною пластичною деформацією металу в області контакту [42]. Істотний вплив на результат експерименту надає і чистота поверхні зразка. Так, в [40], окрім наведеного на рис. 5 графіка $G_{pc}(\omega)$, одержаного на плівковому зразку, були також зняті спектри і на масивному полікристалічному зразку. В останньому випадку взагалі був відсутній високоенергетичний пік, а рівень нульових аномалій і рівень шуму були значно вище. Цікаво відзначити, що схожа ситуація з приду-

шенням високоенергетичного піка спостерігалася і в експериментах по визначенню функції електрон-фононої взаємодії методом тунельної спектроскопії в Nb. Високоенергетичний пік, одержаний в розрахунках, був повністю придушений на експериментальній кривій [43]. Цю відмінність досить докладно розглянуто в літературі, і для її пояснення запропоновано низку аргументів.

Перш за все було відмічено, що Nb досить легко утворює оксиди на поверхні, які стають причиною виникнення ефекту близькості, що придушує високоенергетичний пік в експериментах по тунельній мікроскопії. На підтвердження цієї гіпотези в роботі [8] були приведені експериментальна і теоретична функції $\alpha^2 F(\omega)$ для Ta. Тантал відомий тим, що практично не активний у з'єднаннях з киснем. Для цього металу вдалося одержати досить хороший збіг теорії з експериментом. В роботі [38] також була запропонована гіпотеза, що методика тунельної спектроскопії не відображає весь «обсяг» електрон-фононої взаємодії, особливо це стосується високоенергетичної області. Дійсно, площа під високоенергетичною частиною спектра виявляється в кілька разів менше, ніж площа низькочастотної області (див. рис. 5). Як було показано в [5], довжина вільного пробігу електронів, що беруть участь у електрон-фононій взаємодії, зменшується по мірі просування по фононій енергетичній шкалі в бік більших енергій. (Більше того, оскільки $l(\omega) = v_F \tau(\omega)$, то для d -електронів, швидкість Фермі яких невелика, цей ефект ще додатково посилений.) Таким чином, можна очікувати меншого внеску високоенергетичних фононів в загальний інтегральний тунельний струм і, як наслідок, сильне пригнічення або навіть відсутність високоенергетичних особливостей в $\alpha^2 F(\omega)_{\text{exp}}$.

Наведені вище причини спотворення високоенергетичної частини експериментальної спектральної функції електрон-фононої взаємодії в Nb, цілком ймовірно, можуть мати місце і в МК-спектроскопії технецію.

Кілька слів про становище низькоенергетичного піку G_1 . Експеримент дає значення 13 меВ. У роботі [40] висловлено припущення, що в силу особливостей матричного елемента і форми поверхні Фермі в експерименті відбувається істотний зсув центрального піку в область більш низьких енергій. Так можна було б пояснити участь всієї «низькоенергетичної» групи фононів (14–20 меВ) у створенні низькоенергетичного піку G_1 функції $G_{\text{pc}}(\omega)$. Однак, як уже зазначено вище, $\alpha^2(\omega)$ в основній області — величина практично постійна. Поява G_1 зобов'язана лише самому низькоенергетичному фононному піку 15,2 меВ [12]. Різниця ж у 2,2 меВ між ними можна пояснити тим, що саме в цій енергетичній частині розрахований нами фононний спектр дає трохи завищене значення.

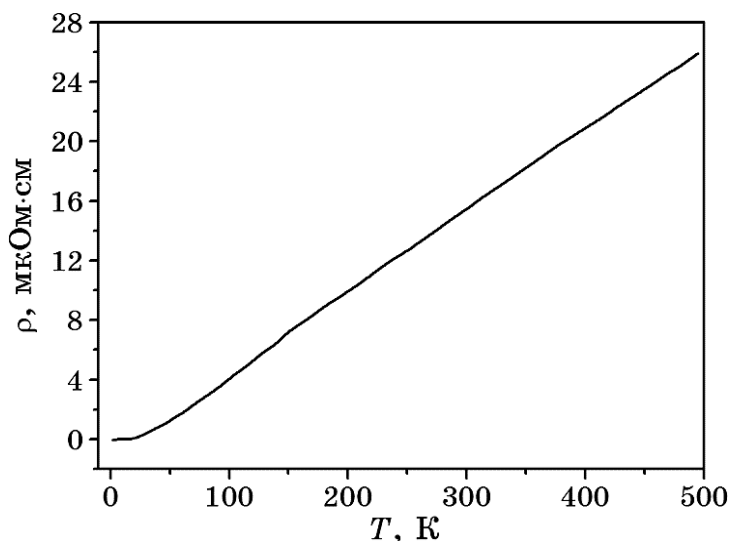


Рис. 6. Теоретично розрахований ґратницевий електроопір технецію.⁸

7.3. Електропровідність

За розрахунком $\Theta_{tr} = 225,8$ К. Таким чином, довільна температурна область становить $T \in [45 \text{ К}, 451,6 \text{ К}]$. На рисунку 6 показано усереднену за трьома напрямками залежність $\rho(T)$. Остання одержана величина $\rho(T) = (1/3)[2\rho_x(T) + \rho_z(T)]$ і може бути безпосередньо використана для порівняння з експериментальними мірваннями електроопору у полікристалах технецію. В роботі [44] наведено значення електропровідності $\sigma = 0,067 \cdot 10^6 / (\text{Ом}\cdot\text{см})$, що було виміряне за нормальних умов. Таким чином, одержуємо $\rho_{\text{exp}}(293,2 \text{ К}) = 14,9 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$. Розрахункове значення $\rho_{\text{th}}(293,2 \text{ К}) = 14,7 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$.

8. РУТЕНІЙ

8.1. Функція Еліашберга

На рисунку 7 наведено графіки розрахованої функції Еліашберга $\alpha^2 F(\omega)$ і коефіцієнта $\alpha^2(\omega)$. За винятком двох невеликих особливостей в районі 20,5–22,5 меВ і 25 меВ коефіцієнт $\alpha^2(\omega)$ можна вважати практично постійної величиною (початкова ділянка < 15 меВ не розглядається в силу обмеженого набору розрахункових даних в низькоенергетичній області фононного спектру). При цьому повинно виконуватися відоме наближення Макміллана [9]: $\lambda_{MM} = \eta / M \langle \omega \rangle^2$.

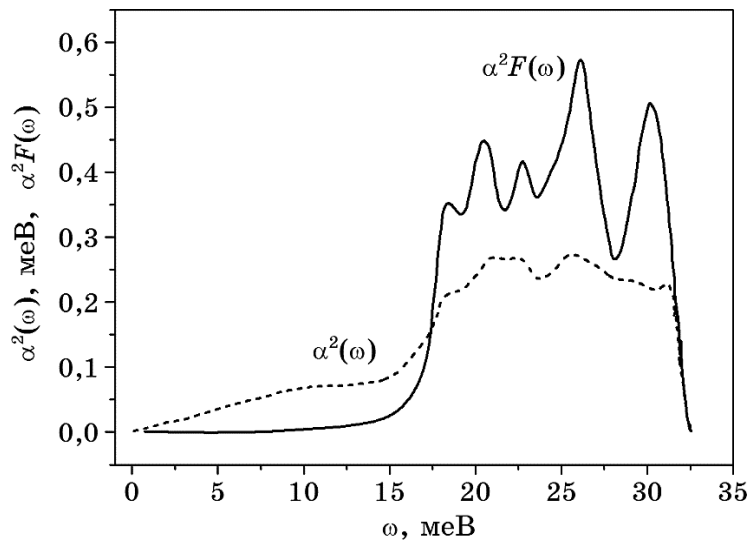


Рис. 7. Функція Еліашберга $\alpha^2 F(\omega)$ та множник $\alpha^2(\omega)$ для рутенію.¹⁰

У таблиці 3 наведено результати наших розрахунків і результати з інших джерел. Використовуючи їх, одержуємо $\lambda_{MM} = 0,4859$. Це значення добре узгоджується з одержаними параметром електрон-фононої взаємодії за формулою (46). Хоча розрахунок в роботі [38] був виконаний у рамках методу ККР і в наближенні жорсткого МТ-зсуву, близькі значення параметрів Хоффілда, одержані в нашій роботі і в роботі [38], дозволяють зробити висновок, що у випадку рутенію наближення жорсткого МТ-зсуву адекватно описує інтегральні характеристики електрон-фононої взаємодії.

8.2. Мікроконтактні спектри

На рисунках 8 і 9 наведено другу похідну вольт-амперної характеристики V_2 і відновлену з неї експериментальну функцію електрон-фононої взаємодії $G_{pc}(\omega)$ для двох напрямків орієнтації кристалу, $[0001]$ і $[10\bar{1}0]$, щодо напрямку протікання струму. Дані одержано

ТАБЛИЦЯ 3. Параметри електрон-фононої взаємодії у рутенії. I — наш розрахунок, II — літературні дані.⁹

Джерело даних	$\langle \omega^2 \rangle^{1/2}$, К	η , ат.од.	λ	ω_{\max} , меВ
I	274,77	0,1369	0,4912	32
II	263,89 [45]	0,1414 [38]	$0,4 \pm 0,1$ [47]	33 [45]

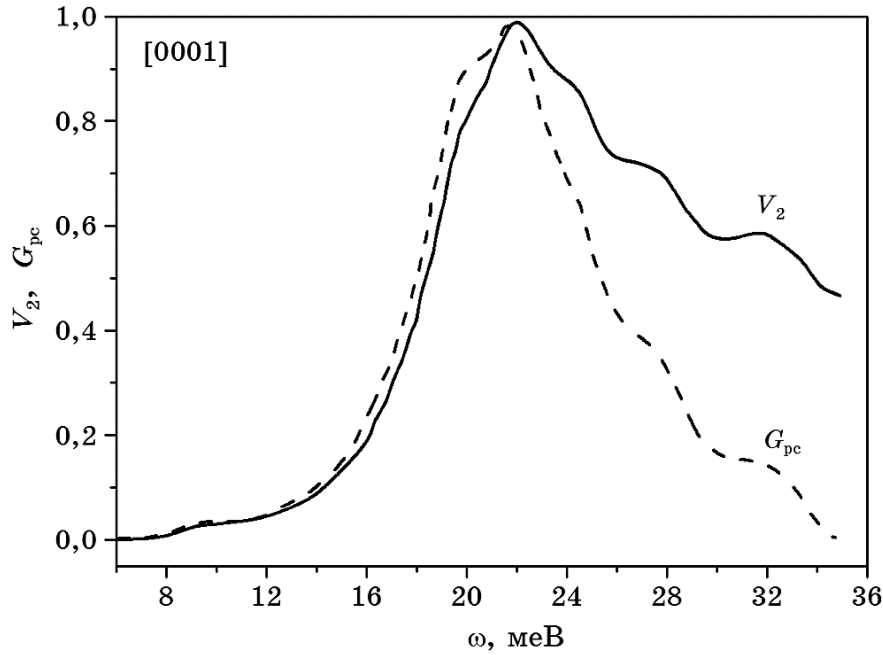


Рис. 8. Друга похідна вольт-амперної характеристики V_2 (в одиницях коефіцієнту A/B^2) для напрямку [0001], що було одержано в роботі [45]. G_{pc} — відновлена мікроконтактна функція електрон-фононої взаємодії.¹¹

за допомогою методи мікроконтактної спектроскопії [45].

Порівнюючи розраховану функцію $\alpha^2 F(\omega)$ з мікроконтактними спектрами, можна відзначити досить хороший збіг положень основних особливостей. Так, МК-спектри мають особливості (максимуми або «плечі») при енергіях 20, 21,5, 24, 27,5 і 31 меВ, функція Еліашберга — при 18, 20,05, 22,05, 25,05 і 30 меВ. Енергетична межа спектру ω_{max} (що визначається, як положення на половині висоти різкого спаду з боку високих енергій) має значення 32 (в нашому розрахунку) та 33 меВ для $G_{pc}(\omega)$.

Порівнюємо тепер відносні інтенсивності особливостей на графіках V_2 , $G_{pc}(\omega)$ і $\alpha^2 F(\omega)$. Легко помітити істотне ослаблення відносної інтенсивності височастотних піків в МК-спектрах і подальше посилення цього ефекту для відновленої з них функції $G_{pc}(\omega)$. Цей факт відзначено майже у всіх дослідженнях перехідних металів і може бути пов'язаний, в першу чергу, зі специфічним відбором фононів в $G_{pc}(\omega)$ по векторах поляризації [46] в методі МК-спектроскопії. Деякі інші причини придушення високоенергетичних особливостей в МК-спектрах детально розглянуто на прикладі Тс у попередньому параграфі. Відзначимо також, що саме відновлення $G_{pc}(\omega)$ з V_2 у роботі [45] виконано у припущенні

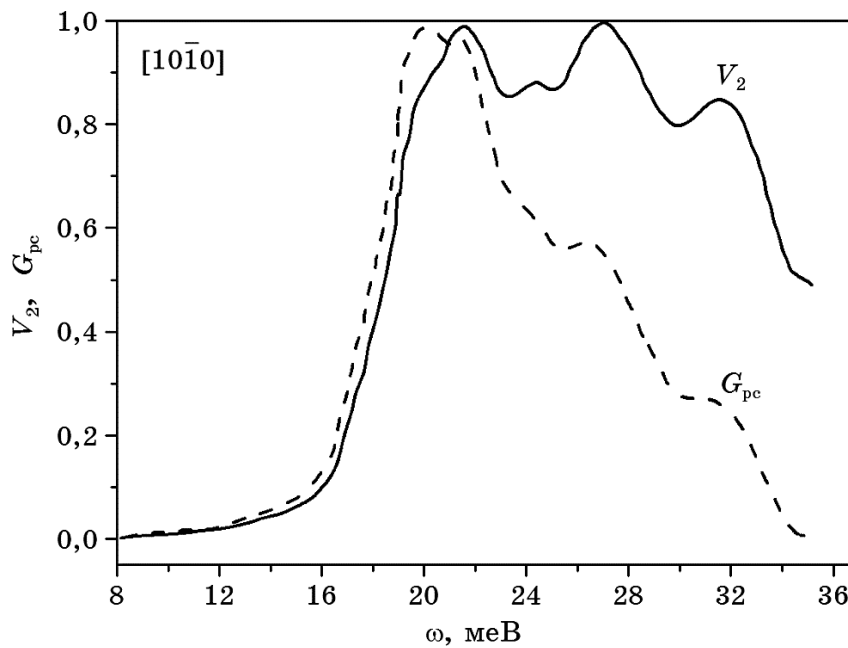


Рис. 9. Друга похідна вольт-амперної характеристики V_2 (в одиницях коефіцієнту A/B^2) для напрямку $[10\bar{1}0]$, що одержано в роботі [45]. G_{pc} — відновлена мікроконтактна функція електрон-фононної взаємодії.¹³

моделю вільних електронів, що для d -металів може давати великі похибки. Як наслідок, одержане експериментальне значення $\lambda_{pc} = 0,76$ істотно відрізняється від значень λ , опублікованих в інших джерелах (див. табл. 3 і 4).

8.3. Транспортні властивості

За розрахунками $\Theta_{tr} = 274,14$ К, таким чином, припустимий інтервал температур: 54,8–548,3 К. На рисунку 10 наведено усереднений за трьома напрямками графік розрахованого електроопору $\rho(T)$.

ТАБЛИЦЯ 4. Транспортні властивості рутенію. I — наш розрахунок, II — літературні дані.¹²

Джерело даних	$N(\epsilon_F), 1/Ry$	Ω_p, eV	$\rho(273,2 K),$ мкОм·см	λ_{tr}
I	11,225	$xx: 7,91$ $zz: 9,03$	7,43	0,48
II	11 [16]	8,9 [16]	7,16–7,6 [44]	0,45 [16]

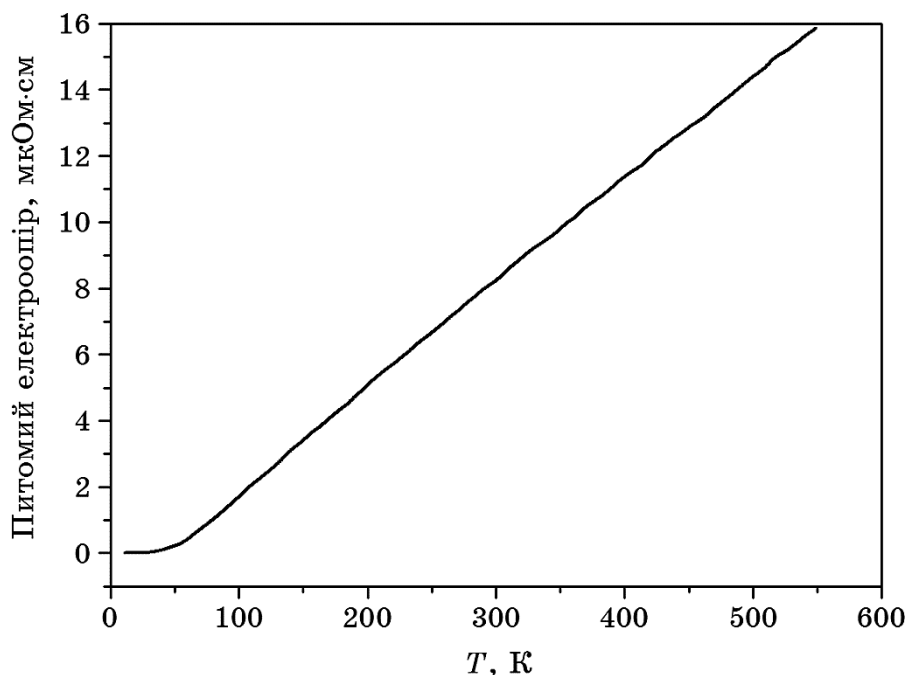


Рис. 10. Теоретично розрахований ґратницевий електроопір рутенію.¹⁴

Також було розраховано діагональні компоненти тензора Друде Ω_p (плазмові частоти) (21) і транспортна константа електрон-фононої взаємодії λ_{tr} .

У таблиці 4 наведено різні дані, одержані за нашому розрахунку, і для порівняння — експериментальні (та розраховані), одержані іншими авторами.

9. ВИСНОВКИ

В рамках методи ЛМТО з урахуванням несферичних доданків кристалічного потенціалу було розраховано питомий електричний опір та температура переходу у надпровідний стан. Функцію Еліашберґа порівняно як з густиною фононних станів шляхом аналізу функції $\alpha^2(\omega)$, так і з експериментальними мікроконтактними спектрами. Сформулюємо стисло деякі важливі результати.

Для електроопору Sc при $T = 300$ К було одержано коефіцієнт анізотропії $\rho_x/\rho_z = 2,53$. Ця величина добре узгоджується з експериментальним співвідношенням — 2,6. Для Tc, Ru та Sc порівняне усереднене за трьома напрямками значення розрахованого електроопору з експериментальними даними для полікристалів.

Одержані нами розрахунки добре узгоджуються з експериментальними роботами.

Для Tc та Ru в усій області суттєвих значень ω виявилось, що $\alpha^2(\omega) \approx \text{const}$. У цьому випадку має бути справедливо наближення Макміллана $\lambda_{MM} = \eta/M\langle\omega^2\rangle$. Використовуючи наші розраховані дані для $\langle\omega^2\rangle$ та η (див. табл. 2 і 3), одержуємо $\lambda_{MM} = 0,9001$ (Tc) та $\lambda_{MM} = 0,4859$ (Ru). Ці значення дуже добре співпадають з розрахованими методом ПП ЛМТО за формулою (46) константами електрон-фононної взаємодії $\lambda = 0,9039$ (для Tc) та $\lambda = 0,4912$ (Ru). Цікаво також відмітити, що у роботі [38] було розраховано параметри Хопфілда для Tc та Ru методом ККР у наближенні жорсткого МТ-зсуву. Близькі значення параметрів Хопфілда, одержані у нашій роботі та в роботі [38], дозволяють зробити висновок, що у випадку рутенію і технецію наближення жорсткого МТ-зсуву адекватно описує інтегральні характеристики електрон-фононної взаємодії. Цікаво значить, що технецій є другим (після ніобію) за величиною T_c надпровідником серед перехідних моноатомних металів зі всієї періодичної таблиці (Менделєєва). Як відомо надпровідність зазвичай корелює із сильною електрон-фононною взаємодією і той факт, що для технецію справедливі рівняння Макміллана, наближення жорсткого зсуву йонів і формула Алена–Дайнса, є трохи несподіваним.

Для Sc наближення Макміллана не працює через те, що $\alpha^2(\omega)$ має монотонно спадаючий характер. Цей факт підкреслює ту обставину, що для перехідних металів апроксимація константою матричного елемента електрон-фононної взаємодії може дати хибний результат у самий несподіваний момент.

Користаючись формулою Алена–Дайнса, одержано $T_c = 2,73$ К для скандію і $T_c = 2,41$ К для ітрію. Отже, якщо враховувати тільки електрон-фононний механізм утворення куперівських пар, приходимо до $T_c \approx 2,5$ К. Для скандію та ітрію спінові флуктуації пригнічують виникнення куперівських пар, саме цей чинник і пояснює відсутність адекватних доказів надпровідності в експериментальних роботах.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. S. M. Sichkar, *J. Supercond. Nov. Magn.*, **28**, 2: 719 (2015).
2. N. H. March and M. Parrinello, *Collective Effects in Solids and Liquids* (Bristol: Adam Hilger Ltd.: 1982).
3. A. B. Migdal, *Soviet Physics JETP*, **7**, No. 6: 996 (1958).
4. R. E. Prange and L. P. Kadanoff, *Phys. Rev.*, **134**: A566 (1964).
5. P. B. Allen, *Phonons and Superconducting Transition Temperature* (Amsterdam: North-Holland Publishing Company: 1980).
6. D. J. Scalapino and P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **133**: A921 (1964).

7. B. Chakraborty, W. E. Pickett, and P. B. Allen, *Phys. Rev. B*, **14**: 3227 (1976).
8. S. Y. Savrasov and D. Y. Savrasov, *Phys. Rev. B*, **54**: 16487 (1996).
9. W. L. McMillan, *Phys. Rev. B*, **167**: 331 (1968).
10. J. J. Hopfield, *Phys. Rev.*, **186**: 443 (1969).
11. W. H. Butler, *Physics of Transition Metals* (New York: AIP: 1980), p. 505.
12. S. M. Sichkar, *Usp. Fiz. Met.*, **16**: 229 (2015) (in Ukrainian).
13. O. Jepsen, O. K. Andersen, and A. R. Mackintosh, *Phys. Rev. B*, **12**: 3084 (1975).
14. R. Asokamani, K. Iyakutti, and V. Devanathan, *Solid State Commun.*, **30**: 385 (1979).
15. L. Hedin and B. I. Lundqvist, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **4**: 2064 (1971).
16. B. A. Sanborn, P. B. Allen, and D. A. Papaconstantopoulos, *Phys. Rev. B*, **40**: 6037 (1989).
17. J. Bass and K. H. Fischer, *Metals: Electronic Transport Phenomena: Electrical Resistivity, Kondo and Spin Fluctuation Systems, Spin Glasses and Thermopower* (Landolt-Börnstein: New Series III/15a: 1982).
18. R. Asokamani and K. Iyakutti, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **10**: 1157 (1980).
19. P. Chatterjee, *Phys. Rev. B*, **27**: 4722 (1983).
20. F. Guillermet and G. Grimvall, *J. Less-Common Met.*, **147**: 195 (1989).
21. P. Blaha, K. Schwarz, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **38**: 9368 (1988).
22. S. L. Altmann and G. J. Bradley, *Proc. Phys. Soc.*, **92**, No. 3: 764 (1967).
23. G. S. Fleming and T. L. Loucks, *Phys. Rev.*, **173**: 685 (1968).
24. J. E. Schirber, A. C. Switendick, and F. A. Schmidt, *Phys. Rev. B*, **27**: 6475 (1983).
25. T. L. Loucks, *Phys. Rev. B*, **144**: 504 (1966).
26. L. F. Mattheiss, *Phys. Rev.*, **133**: A1399 (1964).
27. N. I. Kulikov and Eh. T. Kulatov, *Fizika Nizkikh Temperatur*, **9**, No. 8: 823 (1983) (in Russian).
28. A. Jensen and K. Andres, *Phys. Rev.*, **165**: 545 (1968).
29. J. W. Ross, F. Y. Fradin, L. L. Isaacs, and D. J. Lam, *Phys. Rev.*, **183**: 645 (1969).
30. S. Y. Savrasov, *Solid State Commun.*, **74**, No. 2: 69 (1990).
31. G. S. Knapp and R. W. Jones, *Phys. Rev. B*, **6**: 1761 (1972).
32. P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev. B*, **12**: 905 (1975).
33. R. J. Stierman and K. A. Gschneidner, *J. Magn. Magn. Mater.*, **36**: 249 (1983).
34. F. H. Spedding, D. Cress, and B. J. Beaudry, *J. Less-Common. Met.*, **23**: 263 (1971).
35. J. M. Ziman, *Electrons and Phonons* (Oxford: Oxford University Press: 1960).
36. F. J. Pinski, P. B. Allen, and W. H. Butler, *Phys. Rev. B*, **23**: 5080 (1981).
37. R. Vickery, *The Chemistry of Yttrium and Scandium* (Oxford: New York: Pergamon Press: 1960).
38. W. H. Butler, *Phys. Rev. B*, **15**: 5267 (1977).
39. R. J. Trainor and M. B. Brodsky, *Phys. Rev.*, **12**: 4867 (1975).
40. A. A. Zakharov, M. G. Zemlyanov, M. N. Mikheeva, G. F. Syrykh, and M. B. Tsetlin, *JETP*, **61**, No. 4: 836 (1985).
41. J. Caro, R. Coehorn, and D. G. Groot, *Solid State Commun.*, **39**: 267 (1981).

42. B. Keck and A. Schmid, *J. Low Temp. Phys.*, **24**: 611(1976).
43. J. Bostock, V. Diadiuk, and W. N. Cheung, *Phys. Rev. Lett.*, **36**: 603 (1976).
44. B. V. Nekrasov, *Obshchaya Khimiya* [General Chemistry] (Moscow: Chemistry: **3**: 1970) (in Russian).
45. A. A. Zakharov, S. N. Krainyukov, A. V. Khotkevich, *JETP*, **64**, No. 1: 200 (1986).
46. A. Zhernov, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **15**, No. 3: 579 (1985).
47. G. Grimvall, *The Electron-Phonon Interaction in Metals* (Amsterdam: North-Holland Publ. Co.: 1981).

^{*}*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd.,
UA-03142 Kyiv, Ukraine*

¹ **Fig. 1.** Eliashberg function $\alpha^2F(\omega)$ and the electron-phonon multiplying factor $\alpha^2(\omega)$ for Sc.

² **Fig. 2.** Anisotropy of the transport function, $\alpha_{tr}^2F(\omega)$, for Sc. Solid and dashed lines correspond to the z - and x -direction, respectively.

³ **Fig. 3.** Anisotropy of the lattice resistivity for Sc. Full and dashed lines represent our theoretical calculations for z - and x -direction, respectively. Triangles and circles—experimental data according to Ref. [33] for z - and x -direction, respectively.

⁴ **TABLE 1.** Superconducting transition temperature for Y for different values of the Coulomb screening pseudopotential.

⁵ **Fig. 4.** Eliashberg function $\alpha^2F(\omega)$ and electron-phonon multiplying factor $\alpha^2(\omega)$ for Tc.

⁶ **TABLE 2.** Parameters of electron-phonon interaction for technetium. I—our calculation, II—literature data.

⁷ **Fig. 5.** Experimental point-contact function $G_{pc}(\omega)$ of electron-phonon interaction for Tc [40].

⁸ **Fig. 6.** Theoretically calculated lattice resistivity for technetium.

⁹ **TABLE 3.** Parameters of electron-phonon interaction for ruthenium. I—our calculation, II—literature data.

¹⁰ **Fig. 7.** Eliashberg function $\alpha^2F(\omega)$ and the electron-phonon multiplying factor $\alpha^2(\omega)$ for Ru.

¹¹ **Fig. 8.** The second derivative of the current-voltage characteristic V_2 for the [0001] direction accordingly to Ref. [45]. G_{pc} —restored point-contact function of the electron-phonon interaction.

¹² **TABLE 4.** Transport properties of ruthenium. I—our calculation, II—literature data.

¹³ **Fig. 9.** The second derivative of the current-voltage characteristic V_2 for the [10 $\bar{1}$ 0] direction accordingly to Ref. [45]. G_{pc} —restored point-contact function of the electron-phonon interaction.

¹⁴ **Fig. 10.** Theoretically calculated lattice resistivity for Ru.