

## ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

**Температурная зависимость электросопротивления и эффекта Холла неупорядоченных сплавов  $Au_xPd_{1-x}$** Д. Х. Имамназаров,<sup>1,а</sup> А. Б. Грановский<sup>2,б</sup><sup>1</sup> Самаркандский государственный университет,  
физический факультет, кафедра общей физики

. Узбекистан, 140104, Самарканд, Университетский бульвар, 15.

<sup>2</sup> Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,  
физический факультет, кафедра магнетизма.

Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

Поступила в редакцию 27.02.2020, после доработки 03.03.2020, принята к публикации 20.03.2020.

В рамках приближения когерентного потенциала для  $s-d$ -модели с учетом электрон-фононного взаимодействия рассчитаны концентрационные и температурные зависимости сопротивления  $\rho$  и коэффициента Холла  $R_0$  бинарного неупорядоченного сплава  $Au_xPd_{1-x}$ . На примере данного сплава анализируются механизмы, ответственные за температурные изменения  $\rho$  и  $R_0$ , взаимосвязь  $\rho$  и температурного коэффициента сопротивления, приводящая к правилу Муиджи, а также корреляция между температурной зависимостью  $R_0$  и температурным коэффициентом сопротивления. Рассчитанные концентрационные и температурные зависимости  $\rho$  и  $R_0$  хорошо согласуются с экспериментальными данными для сплава  $Au_xPd_{1-x}$  во всем диапазоне концентраций.

**Ключевые слова:** электронная структура, плотность электронных состояний, удельное электросопротивление, коэффициент Холла, метод когерентного потенциала.

УДК: 538.9. PACS: 72.15.-v.

**ВВЕДЕНИЕ**

Данная работа посвящена теоретическому исследованию температурных и концентрационных зависимостей электрического сопротивления  $\rho$  и коэффициента нормального эффекта Холла  $R_0$  бинарных неупорядоченных сплавов на основе переходных металлов. Электрическое сопротивление является центральным явлением переноса заряда, и его зависимости от состава сплава, температуры, магнитного поля, деформаций тесно связаны с особенностями электронной структуры и всех взаимодействий носителей тока с другими квазичастицами, и в первую очередь с фононами. Сплавы, обладающие нулевым температурным коэффициентом сопротивления  $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$  (ТКС), к которым, в частности, относятся и сплавы  $Au-Pd$ , используются для покрытий и материалов космической техники. Сплавы с высоким ТКС используются для простых и дешевых резистивных сенсоров температуры, давления, деформаций и др. С другой стороны, эффект Холла является ярким представителем гальваномагнитных явлений, причем весьма чувствительным к тонкой структуре плотности состояний (ПС) на уровне Ферми, что и используется для проверки представлений и расчетов электронной структуры.

Создание приближения когерентного потенциала (ПКП) [1] сыграло решающую роль в разработке методов расчета электронной структуры неупорядоченных сплавов. Объединение этого метода с развитыми для чистых металлов первопринципными методами, как, например, создание метода ККР–ПКП, позволило рассчитывать электронную структуры сплавов с той же точностью, что и чистых металлов, правда только при  $T = 0$ . Метод ПКП также успешно

был применен для расчета остаточного сопротивления разбавленных и концентрированных сплавов (см., например [2]), объяснения нарушения правила Нордгейма [3] и остаточного аномального эффекта Холла [4]. Однако учет электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) в первопринципных расчетах концентрированных сплавов вызывает значительные сложности. Поэтому для объяснения свойств сплавов при конечных температурах используется модельный подход либо методы теории возмущений, правда, последние неприменимы к переходным металлам, характеризующимся сильными примесными рассеяниями и ЭФВ. К настоящему времени многочисленные аномалии в температурных зависимостях явлений переноса в сплавах переходных металлов не получили адекватного объяснения. В частности, это относится к корреляции между ТКС и величиной сопротивления, известной как правило Муиджи [5], или температурного поведения коэффициента Холла [6].

Впервые учет ЭФВ в рамках ПКП был осуществлен в работе Чен и др. [7] для сопротивления однозонной модели сплава. Эта методика оказалась успешной и в применении к двухзонной  $s-d$ -модели [8]. Однако в модельных расчетах работы [8] учитывалось только ЭФВ в  $d$ -зоне и пренебрегалось межзонными переходами, инициируемыми ЭФВ. В работах [10, 11] показано, что эти факторы существенны и теория обобщена для расчета коэффициента Холла.

В настоящей работе в рамках ПКП для  $s-d$ -модели рассчитаны концентрационные и температурные зависимости сопротивления  $\rho$  и коэффициента Холла  $R_0$  бинарного неупорядоченного сплава  $Au_xPd_{1-x}$ . На данном примере анализируются механизмы, ответственные за температурные изменения  $\rho$  и  $R_0$ , взаимосвязь  $\rho$  и ТКС, приводящая к правилу

<sup>а</sup> E-mail: [davron\\_imamnazarov@rambler.ru](mailto:davron_imamnazarov@rambler.ru)<sup>б</sup> E-mail: [gran60@mail.ru](mailto:gran60@mail.ru)

Муиджи, а также корреляция между температурной зависимостью  $R_0$  и ТКС. Рассчитанные концентрационные и температурные зависимости  $\rho$  и  $R_0$  хорошо согласуются с экспериментальными данными для сплава  $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$  во всем диапазоне концентраций.

### 1. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА

Гамильтониан  $s$ - $d$ -модели парамагнитного неупорядоченного сплава замещения  $\text{A}_x\text{B}_y$  ( $x + y = 1$ ) в ванье-представлении с учетом ЭФВ можно записать в следующем виде [7–9]:

$$\mathcal{H} = \sum_{m \neq n}^{\alpha} t_{mn}^{\alpha} a_{\alpha m}^{\dagger} a_{\alpha n} + \sum_n^{\alpha} (\varepsilon_n^{\alpha} + \theta_n^{\alpha}) a_{\alpha n}^{\dagger} a_{\alpha n} + \sum_{m,n} (\gamma_{mn} + \theta_{mn}) (a_{sm}^{\dagger} a_{dn} + a_{sn} a_{dm}^{\dagger}), \quad (1)$$

где  $\alpha = s, d$  — индексы зон,  $t_{mn}^{s(d)}$  — интегралы перескока, которые в одноузельном варианте ПКП считаются трансляционно-инвариантными и определяются фурье-образами законов дисперсии соответствующих зон:

$$t_{mn}^{s(d)} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^{s(d)}(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)]$$

( $N$  — число узлов системы,  $\mathbf{k}$  — квазиимпульс,  $\mathbf{R}_m$  — радиус-вектор узла  $m$ ); второй член в гамильтониане (1) описывает внутризонные вклады кулоновского случайного потенциала и потенциала ЭФВ, они зависят от сорта занимающих узлы атомов, а последний член характеризует гибридизацию за счет как кулоновского потенциала, так и ЭФВ. В общем случае  $\gamma_{mn}$  — матричные элементы гибридизационного потенциала имеют вид

$$\gamma_{mn} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{mn}(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)].$$

Но при расчетах электронной структуры обычно считается, что  $\gamma(\mathbf{k}) = \gamma$ , тогда  $\gamma_{mn} = \gamma \delta_{mn}$ . Такое приближение оправдано при вычислениях спектра, но приводит к отсутствию межзонных матричных элементов скорости  $v_{sd}^i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_i} \gamma(k)$  ( $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ ), которые могут играть существенную роль в явлениях переноса [9]), что ниже будет учтено при расчетах  $\rho$  и  $R_0$ . Гибридизационный вклад ЭФВ  $\theta_{mn}$ , описываемый последним членом в гамильтониане (1), по сути, аналогичен  $\gamma_{mn}$  и приводит к тому, что гибридизация зависит от температуры, что и будет учтено при расчетах. Как и в подходе Чена и др. [7], чтобы перейти от фононного операторного уравнения к скалярному виду, путем замены оператора  $\theta_n$  флуктуирующей переменной  $\eta$  и с последующим усреднением с функцией распределения Гаусса [7]

$$P_n^{\alpha}(\eta) = (2\pi\eta_n^{\alpha})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\eta^2}{2\nu_n^{\alpha}}}, \quad (2)$$

где  $\nu_n^{\alpha}$  — параметр теории приближения потенциала деформации, пропорционального квадрату матричного элемента ЭФВ и фактору Дебая–Валлера.

Согласно работе [7], параметр  $\nu_n^{\alpha}$  для  $s$ -электронов имеет вид  $\nu_n^{\alpha} \approx \frac{4}{9} \varepsilon_F^2 \cdot 0.04 \frac{T}{T_m}$ , а для  $d$ -электронов  $\nu_n^d \approx 0.03 \frac{w_d^2}{Z} \frac{T}{T_m}$ , где  $w_d$  — полуширина  $d$ -зоны,  $Z$  — число ближайших соседей (координационное число),  $T$  — абсолютная температура,  $T_m$  — температура плавления сплава.

Гриновская функция данной модели и собственно-энергетическая часть (когерентный потенциал)  $\Sigma(z)$  представляют собой матрицы  $2 \times 2$ . Считая, что недиагональные элементы  $\Sigma_{sd}(z) = \gamma$ , расчет диагональных компонент  $\Sigma(z)$  проводится самосогласованным образом по известной схеме ПКП с конфигурационным и температурным усреднением матрицы рассеяния (см. [7–9]):

$$\left\langle \left\langle \frac{\varepsilon_n^{\alpha} + \theta_n^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}}{1 - (\varepsilon_n^{\alpha} + \theta_n^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}) F_{\alpha\alpha}} \right\rangle_c \right\rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left\langle (2\pi\eta_n^{\alpha})^{-1} \times \times e^{-\frac{\eta^2}{2\nu_n^{\alpha}}} \left( \frac{\varepsilon_n^{\alpha} + \theta_n^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}}{1 - (\varepsilon_n^{\alpha} + \theta_n^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}) F_{\alpha\alpha}} \right) \right\rangle = 0 \quad (3)$$

или

$$\langle t_n^{\alpha} \rangle = x \int_{-\infty}^{\infty} P_A(\eta) \frac{\varepsilon_A^{\alpha} + \theta_A^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}}{1 - (\varepsilon_A^{\alpha} + \theta_A^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}) F_{\alpha\alpha}} d\eta + (1-x) \int_{-\infty}^{\infty} P_B(\eta) \frac{\varepsilon_B^{\alpha} + \theta_B^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}}{1 - (\varepsilon_B^{\alpha} + \theta_B^{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}) F_{\alpha\alpha}} d\eta = 0,$$

где  $\langle t_n^{\alpha} \rangle$  — матрица рассеяния на атоме расположенном в узле  $n$ ,  $F_{\alpha\alpha}(z)$  — диагональный матричный элемент функции Грина  $F_{\alpha\alpha}(z) = \langle n | G_{\alpha\alpha}(z) | n \rangle$ , определяемые через усредненные гриновские функции  $G_{\alpha\beta}(z)$  и затравочные законы дисперсии  $N_0(E)$ .

В рамках ПКП расчет кинетических коэффициентов базируется на формуле Кубо–Гринвуда, причем для кристаллических неупорядоченных сплавов с короткодействующим потенциалом рассеяния двухчастичная функция Грина в ПКП равна произведению одночастичных функций Грина [1]. Выражения для расчета электропроводности  $\sigma$  и коэффициента Холла  $R_0$  приведены в Приложении.

### 2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В таблице приводятся значения исходных параметров для чистых компонент сплава Au и Pd, использованных для расчета концентрационной и температурной зависимости электронной структуры, электросопротивления  $\rho$  и коэффициента нормального эффекта Холла  $R_0$  сплавов модельного бинарного сплава переходного и благородного металла произвольной концентрации. Значения энергетических параметров даны в электронвольтах, причем для упрощения расчетов принята полуэллиптическая форма для затравочной плотности состояний

$$N_0(E) = \begin{cases} 2(\pi\omega^2)^{-1}(\omega^2 - E^2)^{1/2}, & |E| \leq \omega, \\ 0, & |E| > \omega, \end{cases} \quad (4)$$

Таблица. Основные параметры электронной структуры Au и Pd

	$\gamma$	$\omega_s$	$D$	$\varepsilon_s$	$\varepsilon_d$	$\varepsilon_F$	$\varepsilon_d - \varepsilon_{\Gamma 1}$	$v_n^s$	$v_n^d$
Au	1.29	7	0.4	-2.10	-6.10	-1.00	8.20	$1.6 \times 10^{-5}T$	$1.6 \times 10^{-5}T$
Pd	1.09	7	0.5	-1.74	-3.48	-4.49	7.97	$6.4 \times 10^{-5}T$	$3.2 \times 10^{-5}T$

где  $\omega$  — полуширина  $s$ - или  $d$ -зоны и  $\omega_d^{A(B)} = D^{A(B)}\omega_s^{A(B)}$ . Значения указанных параметров выбраны согласно расчетам электронной структуры Au и Pd (см. таблице, выбор параметров для расчета в ПКП в монографии [1]). Следует отметить, что для данной системы сплавов параметры гибридизации не являются малыми, поэтому она удобна для исследований гибридизационных эффектов.

Учитывая модельный характер плотности состояний (4), для упрощения расчетов примем

$$\begin{aligned} \Sigma_{sd}(E) &= \gamma; \quad v_n^{sd} = \sqrt{v_n^s v_n^d}; \quad v_s = x v_{Au}^s + (1-x) v_{Pd}^s; \\ v_d &= x v_{Au}^d + (1-x) v_{Pd}^d; \quad \gamma = x \gamma_{Au} + (1-x) \gamma_{Pd}; \\ v_{sd} &= (\gamma/\omega_s) v_{ss}; \quad D = x D_{Au} + (1-x) D_{Pd}. \end{aligned}$$

На первом этапе рассчитывались гриновские функции и когерентные потенциалы (выражения (2), (3)), далее определялись плотности состояний и энергии Ферми, считая, что полное число электронов  $s$ - и  $d$ -зон, согласно электронной структуре Au ( $d^{10}s^1$ ), Pd ( $d^{10}s^0$ ), равно  $n_{Au} = 11$  и  $n_{Pd} = 10$  соответственно. Затем, используя выражения Приложения для  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{xy}$ , заменяя выражения, содержащие скорости электронов в виде [7–10]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - \varepsilon_k(k)) |v_{ss}(k)|^2 &= \frac{2v_m^2}{\pi\omega_s} \left[ 1 - \left( \frac{E}{\omega_s} \right)^2 \right]^{3/2}; \\ \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - \varepsilon_k(k)) |v_{ss}(k)|^4 &= \frac{4v_m^4}{\pi\omega_s} \left[ 1 - \left( \frac{E}{\omega_s} \right)^2 \right]^{5/2}; \end{aligned}$$

где  $v_m = \frac{1}{\hbar} \frac{a}{\sqrt{3}} \omega_s$  — максимальная скорость электронов в зоне ( $a$  — среднее межатомное расстояние в сплаве), и далее, принимая  $\omega_s = 1$ , проводился численный расчет  $\rho$  и  $R_0$ .

На рис. 1 приведены рассчитанные кривые ПС  $N(E)$  модельного сплава при трех различных температурах. Как видно из рисунка, два  $d$ -подобных пика на кривой плотности состояний заметно расщеплены. При изменении концентрации будет изменяться форма ПС и амплитуда пиков и уровень Ферми будет перемещаться из области одного пика  $d$ -состояний к другому пику, пересекая область минимума плотности  $d$ -состояний. Наличие этого минимума во многом определяет концентрационные зависимости электросопротивления и коэффициента Холла сплава (рис. 2, 3), в то время как влияние  $sd$ -гибридизации и, следовательно, эффективного  $sd$ -рассеяния наиболее резко проявляется при тех концентрациях, когда уровень Ферми попадает в область максимума плотности  $d$ -состояний. С ростом температуры пики уменьшаются по величине, а в области минимума ПС увеличивается и в целом исходная ПС сильно размывается.

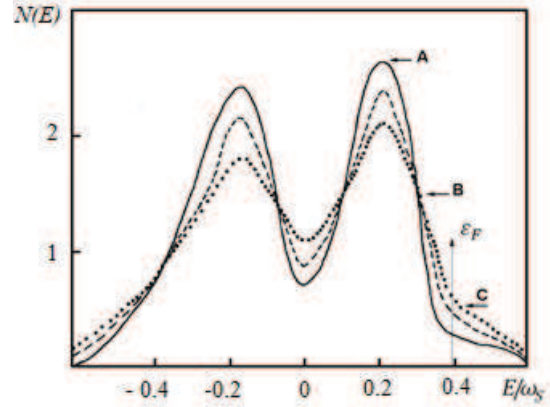


Рис. 1. Температурная зависимость полной плотности состояний бинарного эквипотомного сплава. Положение уровня Ферми для сплава  $Au_{50}Pd_{50}$  показано кривой — —  $T = 0$ ; - - -  $T_1 = 400$  К;  $\cdots$  —  $T_2 = 800$  К

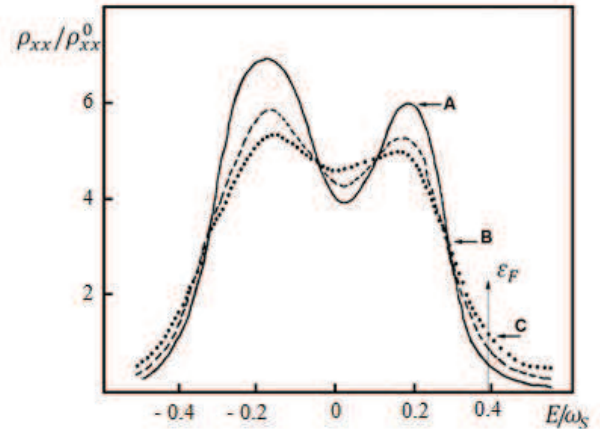


Рис. 2. Температурная зависимость нормированного удельного электросопротивления  $\rho$  бинарного эквипотомного сплава в зависимости от положения уровня Ферми (где  $\rho_{xx}^0 = \frac{3\pi^2\Omega}{4v_m^2 e^2}$ ). Нормируемое электросопротивление равно 32 мкОм·см при температуре  $T = 600$  К. Положение уровня Ферми для сплава  $Au_{50}Pd_{50}$  показано кривой — —  $T = 0$ ; - - -  $T_1 = 400$  К;  $\cdots$  —  $T_2 = 800$  К

На рис. 2 приведено удельное электросопротивление рассматриваемого модельного сплава при различных температурах в зависимости от положения уровня Ферми. Как видно из рисунка, когда уровень Ферми находится между двумя пиками, при повышении температуры энергетическая яма между двумя пиками пополняется и  $\rho$  будет расти с повышением температуры, то же происходит и на краях зоны. Величина удельного электросопротивления  $\rho$  и ТКС  $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$  чувствительны к изменениям положения уровня Ферми: в точке А  $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} < 0$ , в точке В  $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} = 0$  и в точке С  $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} > 0$ . В сплаве  $Au_{50}Pd_{50}$  уровень Ферми находится в пределах точки С. Поэтому электросопротивление с повышением температуры

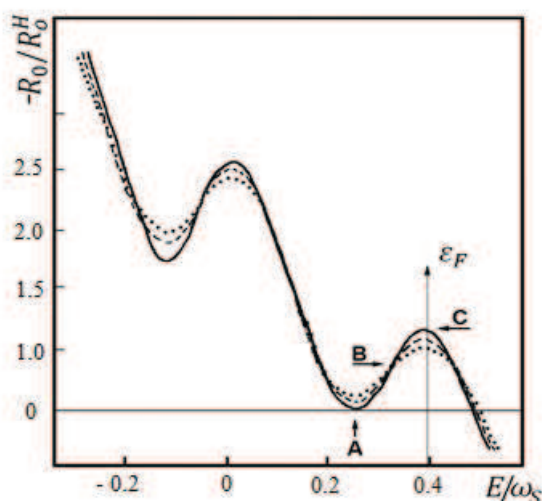


Рис. 3. Температурная зависимость нормированного коэффициента Холла бинарного эквиатомного сплава. Положение уровня Ферми для сплава  $\text{Au}_{50}\text{Pd}_{50}$  показано стрелкой ( $R_0^H = \frac{-3\pi\Omega}{8ec}$ ). Нормируемый коэффициент Холла равен  $21.3 \cdot 10^{-5} \text{ см}^3 \cdot \text{Кл}$  при температуре  $T = 800 \text{ К}$  —  $T = 0$ ; - - -  $T_1 = 400 \text{ К}$ ; ··· —  $T_2 = 800 \text{ К}$

для сплава этого состава повышается, что соответствует эксперименту. Ход кривых ПС и  $\rho$  согласуется между собой. Полученные данные позволяют на качественном уровне объяснить правило Муиджи за счет размытия ПС: когда сопротивление велико, то  $\text{ТКС} < 0$ , и наоборот,  $\text{ТКС} > 0$  при малом сопротивлении. Однако развитая теория не объясняет эффект насыщения температурной зависимости сопротивления [5] при высоких температурах. По-видимому, это связано с использованием гармонического приближения.

На рис. 3 приведены температурные зависимости коэффициента Холла  $R_0$  в зависимости от энергии. Как видно из рисунка, в выделенных точках  $R_0$ , в отличие от  $\rho$ , имеет противоположные различные температурные зависимости (в точке А увеличивается, в точке В не изменяется и в точке С уменьшается). Для сплава  $\text{Au}_{50}\text{Pd}_{50}$  уровень Ферми находится на краю  $d$ -зоны, поэтому константа Холла с повышением температуры линейно уменьшается. На основе этих расчетов можно предложить, по аналогии с критерием Муиджи, корреляцию между ТКС и температурной зависимостью коэффициента Холла: они должны быть противоположны по знаку.

На рис. 4 представлены концентрационные зависимости электросопротивления  $\rho$  и температурного коэффициента сопротивления (ТКС)  $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$  сплавов  $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$ . Так как расчеты выполнены в относительных единицах  $\rho/\rho^*$ , то для сопоставления экспериментальных и расчетных данных в качестве  $\rho^*$  использовались значения электросопротивления при температуре 600 К — 32 мкОм·см. Анализ расчетов показывает, что на ход температурной зависимости электросопротивления переходных металлов решающее влияние оказывает изменение ПС  $d$ -электронов на уровне химического потенциала за счет ЭФВ, которое приводит к существенной деформации ПС металла. Причем эта деформация в несколько раз превосходит изменения ПС, обуслов-

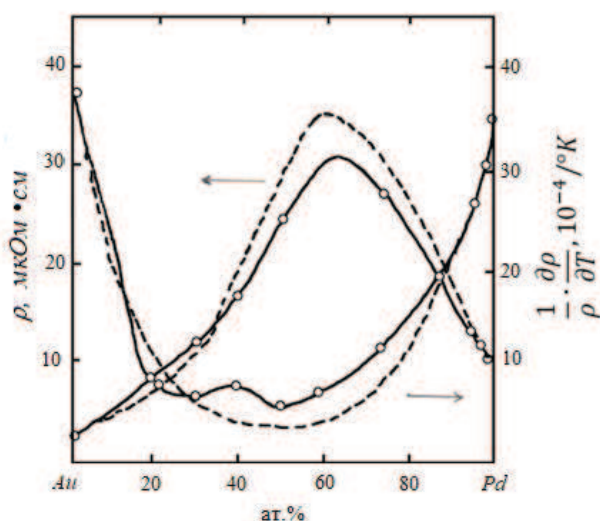


Рис. 4. Концентрационная зависимость удельного электросопротивления  $\rho$  и ТКС  $\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$  для сплавов  $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$ . — — эксперимент [6]; - - - — расчет

ленные одним лишь тепловым размытием функции распределения Ферми. В результате этого уровень Ферми заметно смещается по энергетической шкале, а ПС  $d$ -электронов на уровне Ферми уменьшается с повышением температуры для всех исследованных металлов.

Как видно из рисунка, концентрационная зависимость  $\rho$  имеет асимметричный вид, максимальное значение соответствует концентрации 60 ат. % Au, хотя расчет дает завышенное значение сопротивления для этой концентрации. Во всем концентрационном интервале ТКС положителен и электросопротивление растет с повышением температуры линейно, что согласуется с корреляцией Муиджи [5]. В целом рассчитанные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными во всем концентрационном диапазоне. Незначительные расхождения связаны с модельным характером затравочной плотности состояний и с тем, что недиагональные компоненты когерентного потенциала находились без самосоглашения. Надо также отметить, что в модели не учитывается возможный ближний порядок.

На рис. 5 представлены концентрационные зависимости коэффициента Холла  $R_0$  и температурного коэффициента Холла (ТКХ)  $\frac{1}{R_0} \frac{\partial R_0}{\partial T}$  сплавов  $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$ . Экспериментально установлено, что коэффициент Холла линейно зависит от температуры. Температурный коэффициент Холла, как и температурный коэффициент сопротивления, сильно снижается при небольших добавках легирующего элемента, особенно для сплавов, богатых палладием. Коэффициент Холла сплавов при 12–95% ат. (а при расчете 20–90% ат.) Pd отрицательный, а в остальной области концентраций сплавов положительный. ТКХ слабо изменяется в пределах от  $0.7 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}$  до  $4.1 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}$ . Следует обратить внимание на смену знака ТКХ, наблюдаемого при добавках свыше 5% ат. Au к палладию и свыше 12% ат. Pd (при расчетах примерно до 20% ат. Pd) к золоту. Смена знака коэффициента Холла для этих сплавов, по-видимому, связана с вкладами в электропроводность,



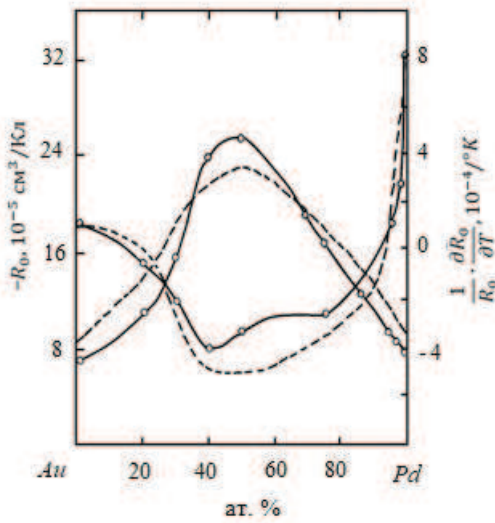


Рис. 5. Концентрационная зависимость константы Холла  $R_0$  температурного коэффициента Холла  $\frac{1}{R_0} \frac{\partial R_0}{\partial T}$  сплавов  $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$ . — эксперимент [6]; - - - расчет

определяемыми с межзонными матричными элементами скорости [10]. Несмотря на модельный характер расчета, получено хорошее согласие с экспериментом во всем диапазоне концентраций.

Таким образом, полученные результаты расчета температурных зависимостей  $\rho$  и  $R_0$  неупорядоченных сплавов  $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$  при температурах выше дебаевской, возникающих при рассеянии электронов на потенциале и тепловых колебаниях решетки сплава, хорошо согласуются с экспериментальными данными, что можно рассматривать как дополнительное подтверждение применимости предлагаемого метода для расчета электронной структуры и кинетических явлений неупорядоченных сплавов переходных металлов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Эренрейх Г., Шварц Л. Электронная структура сплавов. М., 1979. 198 с.
2. Tsioukin Yu. Yu., Voloshinskii A. N., Gapontsev V. V., Ustinov V. V. // Phys. Rev. B. 2005. **71**. N 18. 184206.
3. Brouers F., Vedyayev A. V. // Phys. Rev. B. 1972. **5**, N 2. P. 348.
4. Ведяев А. В., Грановский А. Б., Котельникова О. А. Кинетические явления в неупорядоченных ферромагнитных сплавах. МГУ, 1992. 158 с.
5. Gunnarsson O., Calandra M., Han J. E. // Rev. Mod. Phys. 2003. **75**, P. 1085.
6. Кестер В., Хальперн Т. Сплавы Au-Pd. // Сб. «Тонкая структура и свойства твердых растворов». Пер. с нем. М., 1968. С. 177.
7. Chen A. B., Weisz G., Sher A. // Phys. Rev. B. 1972. **5**, N 8, P. 2897
8. Brouers F., Brauwiers M. // J. Phys. 1975. **V36**, P. L17
9. Howson M. A., Morgan G. J. // Phil. Mag. B. 1985. **51**. P. 439.
10. Грановский А. Б., Имамназаров Д. Х., Халилов И. Х. // ФММ. 1991. № 7. С. 25.
11. Ведяев А. В., Грановский А. Б., Халилов И. Х. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1991. **32**, № 5. С. 61. (Vedyayev A. V., Granovskii A. B., Khalilov I. Kh. et al. // Moscow Univ. Phys. Bull. 1991. **46**, N 5. P. 59.)

#### Приложение: Электропроводность и коэффициент Холла

Выражения для электропроводности  $\sigma$  и коэффициента Холла  $R_0$  в ПКП для  $s$ - $d$ -модели имеют следующий вид (детали расчета даны в работах [10, 11]):

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}(\varepsilon_F) &= \sigma_{xx}^{ss}(\varepsilon_F) + \sigma_{xx}^{dd}(\varepsilon_F) + 2(\sigma_{xx}^{sd}(\varepsilon_F))', \\ \sigma_{xx}^{ss}(\varepsilon_F) &= 2\sigma_0 \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{3/2} dE [\Gamma_{ss}(E; \varepsilon_F)]^2, \\ \sigma_{xx}^{dd}(\varepsilon_F) &= 10\alpha^2 \sigma \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{3/2} dE [\Gamma_{dd}(E; \varepsilon_F)]^2, \\ \sigma_{xx}^{sd}(\varepsilon_F) &= \sqrt{20} \alpha \sigma_0 \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{3/2} dE [\Gamma_{sd}(E; \varepsilon_F)]^2,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\sigma_{xx}^{sd}(\varepsilon_F))' &= \sqrt{20} \left( \frac{\gamma}{\omega_s} \right) \sigma_0 \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{3/2} dE \times \\ &\quad \times [\Gamma_{ss}(E; \varepsilon_F)] [\Gamma_{dd}(E; \varepsilon_F)] + \\ &\quad + 2\sqrt{20} \left( \frac{\gamma}{\omega_s} \right) \sigma_0 \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{3/2} dE \times \\ &\quad \times [\Gamma_{ss}(E; \varepsilon_F)] [\Gamma_{sd}(E; \varepsilon_F)] + \\ &\quad + 2\sqrt{20} \left( \frac{\gamma}{\omega_s} \right) \alpha \sigma_0 \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{3/2} dE \times \\ &\quad \times [\Gamma_{dd}(E; \varepsilon_F)] [\Gamma_{sd}(E; \varepsilon_F)],\end{aligned}$$

$$\sigma_0 = \frac{4v_m^2 e^2 \hbar}{3\pi^2 \Omega \omega_s^4}, \quad \varepsilon_d(k) = \alpha \varepsilon_s(k) \quad (\alpha < 1),$$

$$R_0 = \frac{\sigma_{xy}(B)}{\sigma_{xx}^2 B}, \quad \rho = \frac{1}{\sigma_{xx}},$$

$$\sigma_{xy}(\varepsilon_F) = \sigma_{xy}^{ss}(\varepsilon_F) + \sigma_{xy}^{sd}(\varepsilon_F) + 2(\sigma_{xy}^{sd}(\varepsilon_F))',$$

$$\sigma_{xy}^{ss}(\varepsilon_F) = 2\sigma_H \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{5/2} dE [\mathcal{F}_{ss}(E; \varepsilon_F)]^2,$$

$$\sigma_{xy}^{dd}(\varepsilon_F) = 10\alpha^2 \sigma_H \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{5/2} dE [\mathcal{F}_{dd}(E; \varepsilon_F)]^2,$$

$$\sigma_{xy}^{sd}(\varepsilon_F) = \sqrt{20} \alpha \sigma_H \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{5/2} dE [\mathcal{F}_{dd}(E; \varepsilon_F)]^2,$$

$$\begin{aligned}(\sigma_{xy}^{sd}(\varepsilon_F))' &= \sqrt{20} \left( \frac{\gamma}{\omega_s} \right) \sigma_H \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{5/2} dE \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{\partial^2 R_{sd}(E; \varepsilon_F)}{\partial E^2} [\Gamma_{ss}(E; \varepsilon_F) + \alpha \Gamma_{dd}(E; \varepsilon_F)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial R_{sd}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} \left[ \frac{\partial \Gamma_{ss}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} + \alpha \frac{\partial \Gamma_{dd}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} \right] \right\} +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left( 2\sqrt{20}\alpha \frac{\gamma^2 \alpha^2}{\hbar^2} \frac{9\sigma_H}{v_m^2} \right) \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{5/2} dE \times \\
& \times \left\{ \Gamma_{sd}(E; \varepsilon_F) \left[ \frac{\partial R_{ss}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} + \frac{\partial R_{dd}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} \right] \right\} + \\
& + \left( \sqrt{20}\alpha \frac{\gamma^2 \alpha^2}{\omega_s} \frac{9\sigma_H}{v_m^2} \right) \int_{-\omega_s}^{\omega_s} (\omega_s^2 - E^2)^{5/2} dE \times \\
& \times \left\{ \Gamma_{ss}(E; \varepsilon_F) \frac{\partial R_{dd}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} + \alpha \Gamma_{dd} \frac{\partial R_{ss}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{\alpha\beta}(E; \varepsilon_F) &= \Gamma_{\alpha\beta}(E; \varepsilon_F) \frac{\partial^2 R_{\alpha\beta}(E; \varepsilon_F)}{\partial E^2} + \\
& + \frac{\partial R_{\alpha\beta}(E; \varepsilon_F)}{\partial E} \frac{\partial \Gamma_{\alpha\beta}(E; \varepsilon_F)}{\partial E}, \\
\sigma_H &= \frac{2v_m^4 e^3 \hbar^2 B}{9\pi^3 C \Omega v_s^6},
\end{aligned}$$

где  $f$  — фермиевская функция,  $\Omega$  — объем системы, которая в термодинамическом пределе определяется как  $\Omega = N a^3$  ( $N$  — число узлов,  $a^3$  — объем элементарной решетки),  $B$  — напряженность магнитного

поля, направленного по оси  $z$ ,  $\alpha, \beta = s, d$  — индексы зон,  $c_{ss} = 2$ ,  $c_{dd} = 10$ ,  $c_{sd} = c_{ds} = \sqrt{20}$ ,

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\alpha\beta}(k, \eta) &= \text{Im} \bar{\Gamma}_{\alpha\beta}(k, \eta); \quad R_{\alpha\beta}(k, \eta) = \text{Im} \bar{\Gamma}_{\alpha\beta}(k, \eta); \\
M_{ij\alpha\alpha}^{-1}(k) &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}_{\alpha\alpha}(k)}{\partial k_i \partial k_j}; \\
v_i^{\alpha\alpha}(k) &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_{\alpha\alpha}(k)}{\partial k_i}; \quad v_i^{\alpha\beta}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\gamma(k)}{\partial k_i};
\end{aligned}$$

$G_{\alpha\beta}(k, \eta^+)$  — усредненные гриновские функции  $s$ - $d$  модели, которые имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
G_{ss}(k, \eta^+) &= \left\{ \eta - \mathcal{E}_s(k) - \Sigma_{ss}(\eta) - \right. \\
& \left. - \gamma^2 [\eta - \mathcal{E}_d(k) - \Sigma_{dd}(\eta)]^{-1} \right\}^{-1} \\
\eta_{dd}(k, \eta^+) &= \left\{ \eta - \mathcal{E}_d(k) - \Sigma_{dd}(\eta) - \right. \\
& \left. - \gamma^2 [\eta - \mathcal{E}_s(k) - \Sigma_{ss}(\eta)]^{-1} \right\}^{-1} \\
G_{sd}(k, \eta^+) &= G \bar{G}_{ds}(k, \eta^+) = \gamma \left\{ [\eta - \mathcal{E}_s(k) - \Sigma_{ss}(\eta)] \times \right. \\
& \left. \times [\eta - \mathcal{E}_d(k) - \Sigma_{dd}(\eta)] - \gamma^2 \right\}^{-1}.
\end{aligned}$$

## Temperature Dependence of the Electrical Resistivity and Hall Effect of Disordered $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$ Alloys

D. H. Imamnazarov<sup>1,a</sup>, A. B. Granovsky<sup>2,b</sup>

<sup>1</sup>Department of general physics, Faculty of Physics, Samarkand State University, Samarkand 140104, Uzbekistan.

<sup>2</sup>Department of magnetism, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia. E-mail: <sup>a</sup>davron\_imamnazarov@rambler.ru, <sup>b</sup>gran60@mail.ru.

Within the framework of the coherent potential approximation for the  $s$ - $d$  model, we compute the electrical resistivity  $\rho$  and Hall coefficient  $R_0$  of disordered paramagnetic  $\text{Au}_x\text{Pd}_{1-x}$  alloys, taking the electron-phonon interaction into account. Based on the example of these alloys, the mechanisms responsible for the correlation between the resistivity and its temperature coefficient (Mooij rule) and the correlation between temperature dependencies of  $\rho$  and  $R_0$  are discussed. The results are in good agreement with the experimental data.

**Keywords:** electronic structure, electron density of states, electrical resistivity, Hall coefficient, coherent potential method.

PACS: 72.15.-v.

Received 27 February 2020.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2020. **75**, No. 3. Pp. 230–236.

### Сведения об авторах

1. Имамназаров Даврон Хамраевич — ассистент; тел.: (495) 939-18-47, e-mail: [davron\\_imamnazarov@rambler.ru](mailto:davron_imamnazarov@rambler.ru).
2. Грановский Александр Борисович — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-47-87, e-mail: [gran60@mail.ru](mailto:gran60@mail.ru).