

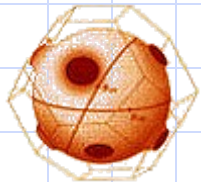
# Transport elektronowy w metalicznych materiałach nieuporządkowanych

**Antoni Paja**

**Zakład Fizyki Ciała Stałego**

**Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej**

**Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie**







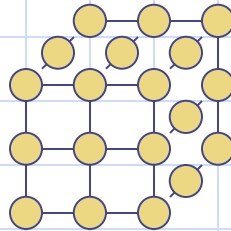


# Plan wystąpienia

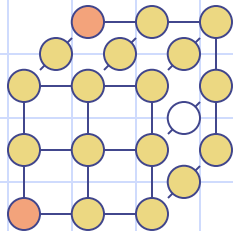
1. Wprowadzenie: rodzaje nieporządku
2. Opór idealny i wpływ domieszek
3. Transport elektronowy
  - ◆ w stopach podstawieniowych
  - ◆ w ciekłych metalach
  - ◆ w szklach metalicznych
4. Podsumowanie

# Wprowadzenie: rodzaje nieporządku

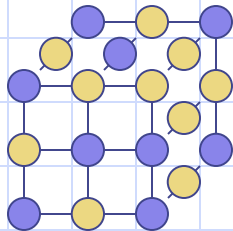
idealny porządek: monokryształ w  $T=0$



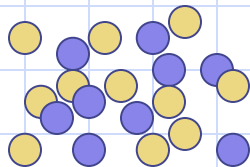
statyczny nieporządek



defekty  
izolowane

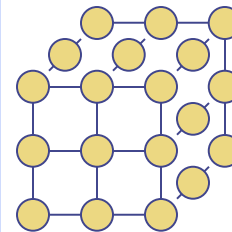


stopa  
podstawieniowa

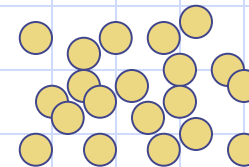


stopa amorficzna  
(szkła metaliczne)

dynamiczny nieporządek



drgania  
termiczne



ciekłe  
metale

# Opór idealny

Teoria Blocha-Gruneisena

Założenia:

3. Elastyczne i nieelastyczne rozpraszanie elektronów przez fonony
2. Model Debye'a dla drgań sieci

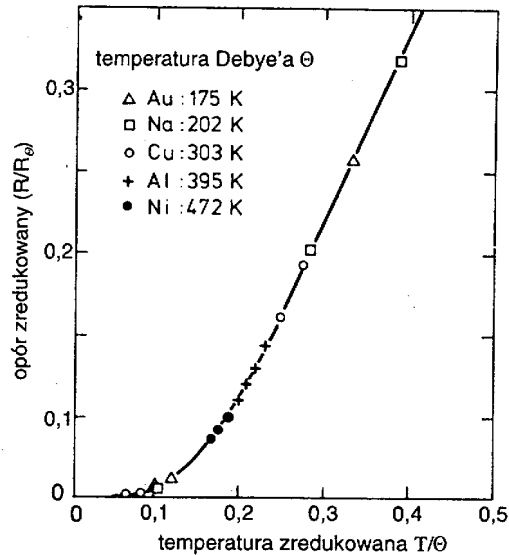
$$\rho_i = \frac{mv_F}{ne^2} N \sigma_a \frac{h^2 q_D^2}{Mk\theta} \left( \frac{T}{\theta} \right)^5 \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{4z^5 dz}{(\exp(z) - 1)(1 - \exp(-z))}$$

$$T \rightarrow 0, \quad \rho_i \propto \left( \frac{T}{\theta} \right)^5$$

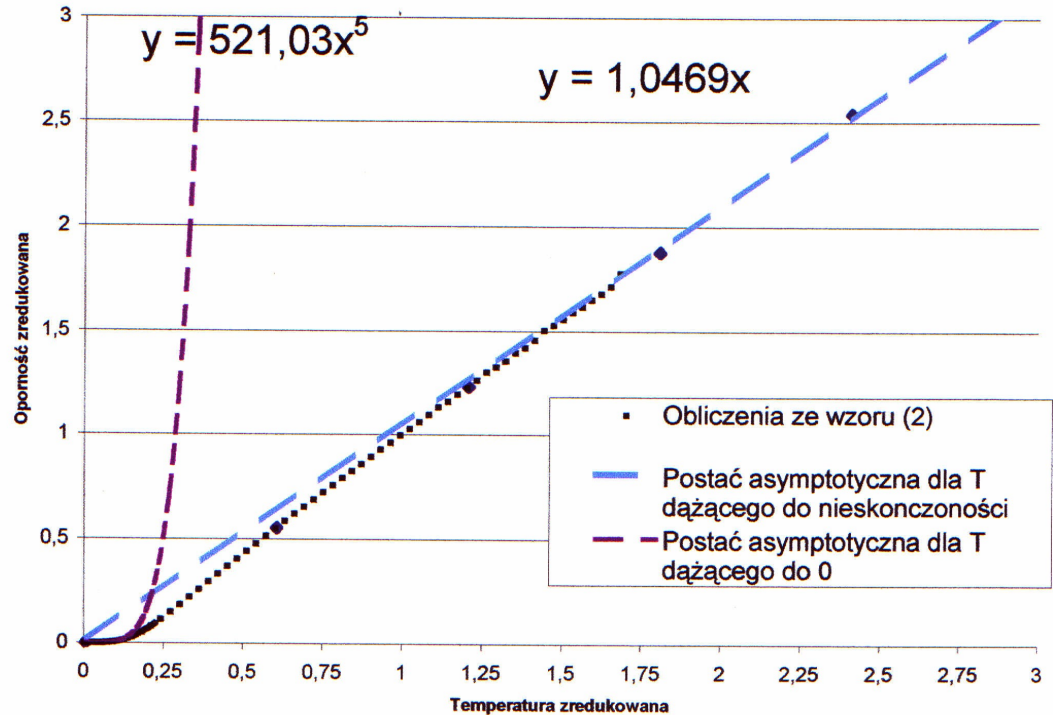
$$T \gg \theta, \quad \rho_i \propto \frac{T}{\theta}$$



# Przebieg oporu idealnego



Rys. 9.8. Uniwersalna zależność zredukowanego oporu ( $R/R_0$ ) jako funkcja temperatury zredukowanej ( $T/\Theta$ ), gdzie  $\Theta$  jest temperaturą Debye'a). Dane eksperymentalne przedstawiono dla kilku różnych metali



rys.5 Obliczenia ze wzoru (2). Dla temperatury zredukowanej 1,75 wykres pokrywa się z asymptotą.

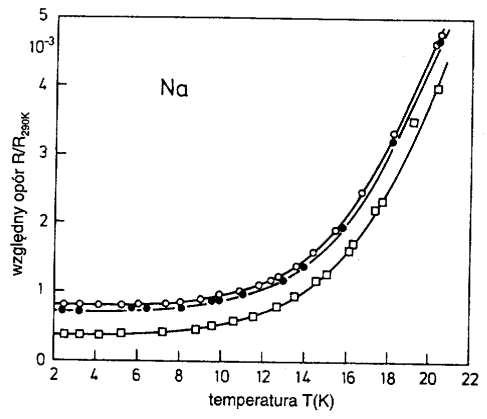
# Opór izolowanych defektów statycznych

◆  $\rho_0$  – niezależne od  $T$

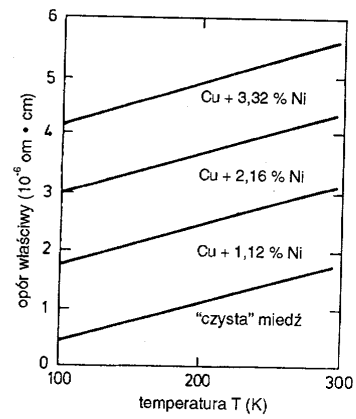
◆  $\rho_0$  – proporcjonalne do koncentracji defektów

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho_i(T)$$

reguła Matthiesena



Rys. 9.6. Opór elektryczny sodu



Rys. 9.7. Opór właściwy  $\rho$  czystej miedzi i stopu miedzi z niklem o różnym składzie (wg [9.4])

Ważny wyjątek – domieszki magnetyczne

$$\rho_m(T) = \rho_0 \left\{ 1 - 2 \left( \frac{J}{N} \right) N(\varepsilon_F) \ln \left( \frac{D}{kT} \right) \right\}$$

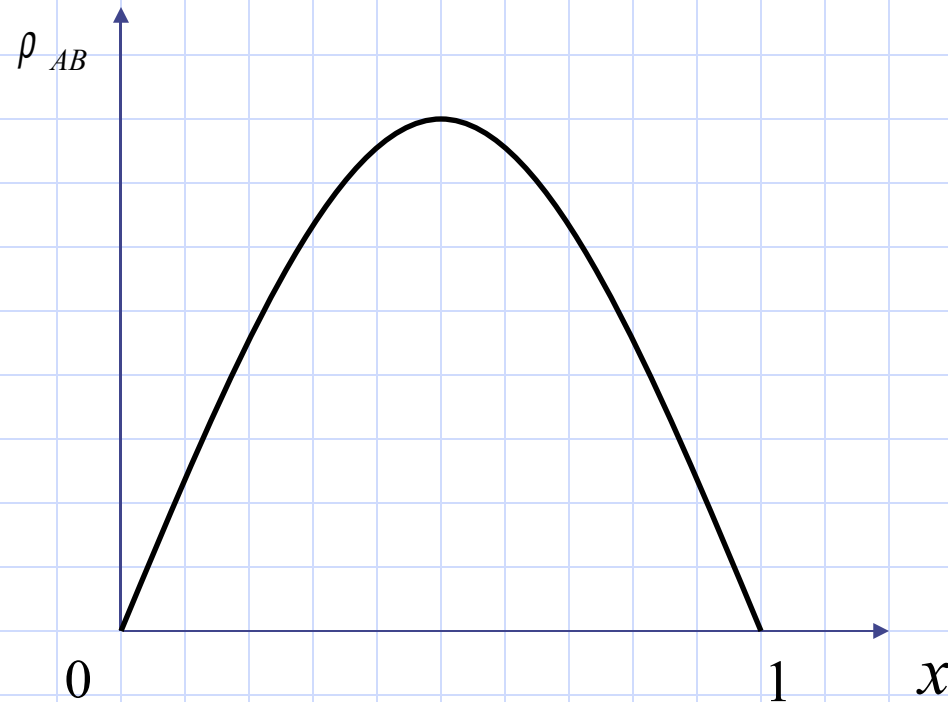
efekt Kondo



# Oporność stopów podstawieniowych $A_x B_{1-x}$

## Fakty empiryczne

$$\rho_{0A} = 0, \quad \rho_{0B} = 0, \quad \rho_{0AB} \neq 0$$



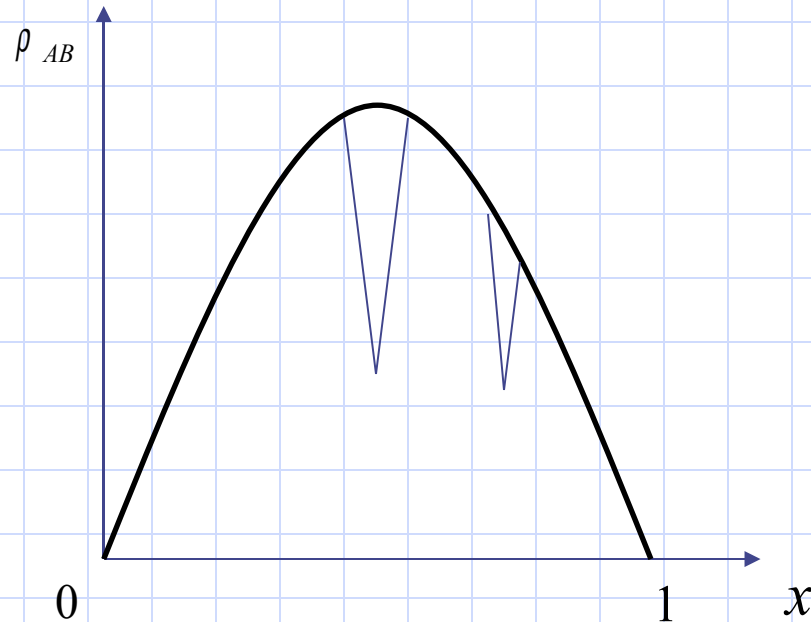
$$\rho_{AB} = \rho_{\max} x(1-x)$$

reguła Nordheima

# Półościowe wyjaśnienie: rozpraszanie na średnim potencjale

$$V_{AB} = xV_A + (1-x)V_B$$

$$\rho_{AB} \propto |V_{AB}|^2 = x^2V_A^2 + x(1-x)V_AV_B + (1-x)^2V_B^2$$



- ◆ źle odtwarza brzegi
- ◆ nie daje wyników ilościowych dla maksimum
- ◆ nie może wyjaśnić minimów dla faz uporządkowanych

# Teoria oporności stopów podstawieniowych przybliżenie koherentnego potencjału (CPA) Velicky, Kirkpatrick, Ehrenreich

- ◆ stop podwójny całkowicie nieuporządkowany
- ◆  $(V_A, V_B) \Rightarrow$  potencjał zespolony  $\Sigma$
- ◆ identyczne kształty obu pasm
- ◆ wielokrotne rozpraszanie

Odtwarza poprawnie regułę Nordheima

Uogólnienia:

- stopy porządkujące się, 50-50 (Plischke i Mattis)
- stopy porządkujące się, dowolny skład (A. P.)
- wpływ drgań sieci (Chen et al.)
- hybrydyzacja s-d (Brouers i Vedyayev, A. P.)

# Transport elektronowy w ciekłych metalach

Fakty doświadczalne:

$\rho(\text{faza ciekła}) > \rho(\text{faza stała})$ ;

najczęściej ujemny współczynnik

$$\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$$

Wyjaśnienie teoretyczne:

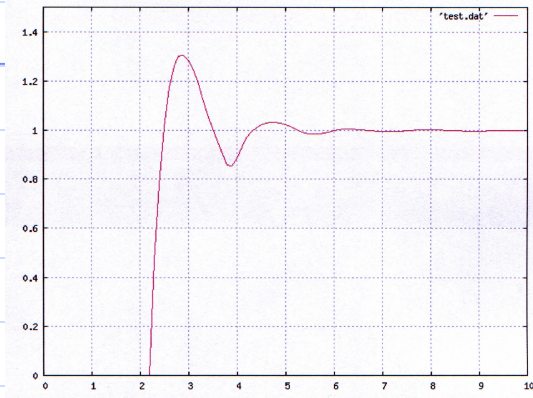
model dyfrakcyjny Fabera-Zimana;

Idea: dyfrakcja fali elektronowej na nieuporządkowanym zbiorze potencjałów.

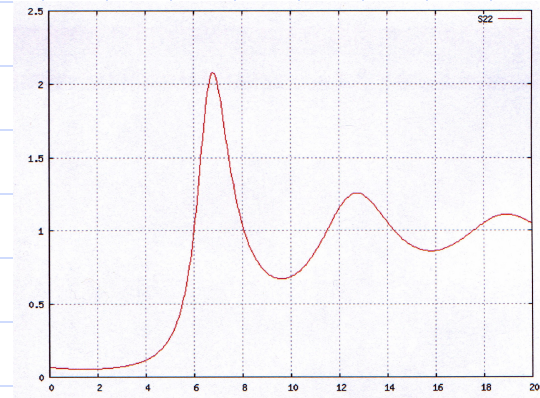
$$\rho = \frac{3\pi m^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k_F^6} \int_0^{2k_F} S(q) |U(q)|^2 q^3 dq$$



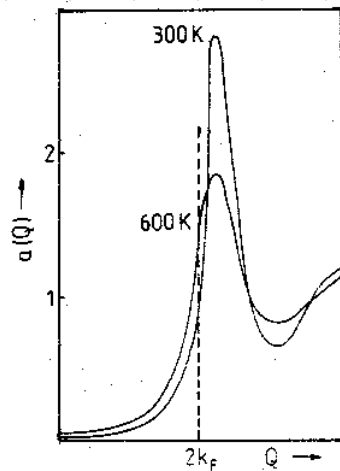
# Struktura i oporność ciekłych metali



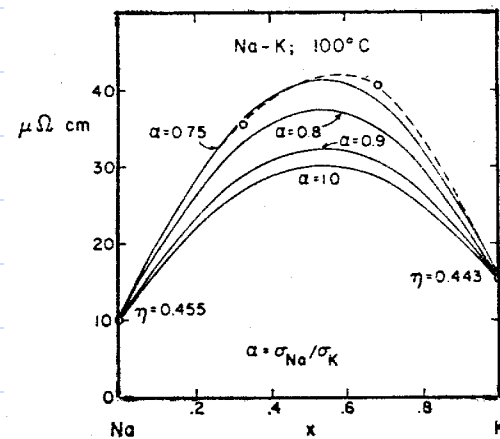
funkcja rozkładu par  $g(r)$



czynnik strukturalny  $S(q)$



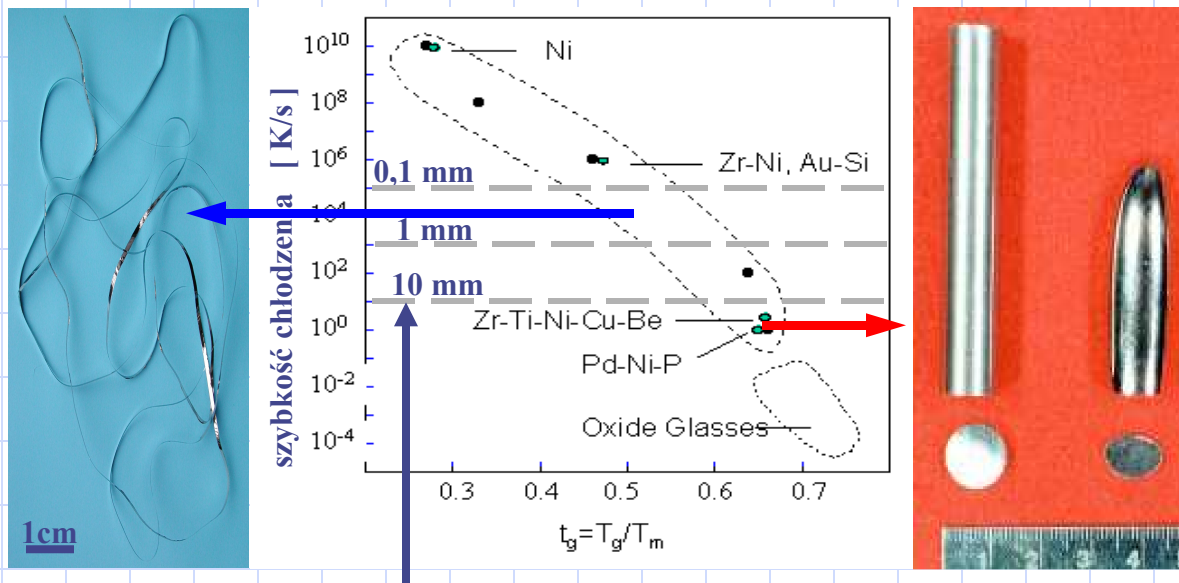
zmiana  $S(q)$  z temperaturą



oporność ciekłego stopu NaK

# Szkła metaliczne

- ◆ Szkło metaliczne – zamrożona struktura ciekłego metalu (stopu)
- ◆ Otrzymywanie – szybkie schładzanie cieczy lub par (Duwez et al. 1960)
- ◆ Produkt końcowy – cienkie warstwy, taśmy, bryłki



φ max producing amorphous material

(masywne szkło metaliczne □ grubość  $\geq 1$ mm)

J. Morgiel,  
IMIM PAN

# Właściwości szkieł metalicznych

- ◆ Duży opór elektryczny (30-500  $\mu\Omega\text{cm}$ )
- ◆ Mała koercja
- ◆ Odporność na złamania
- ◆ Odporność na korozję
- ◆ Struktura podobna do cieczy

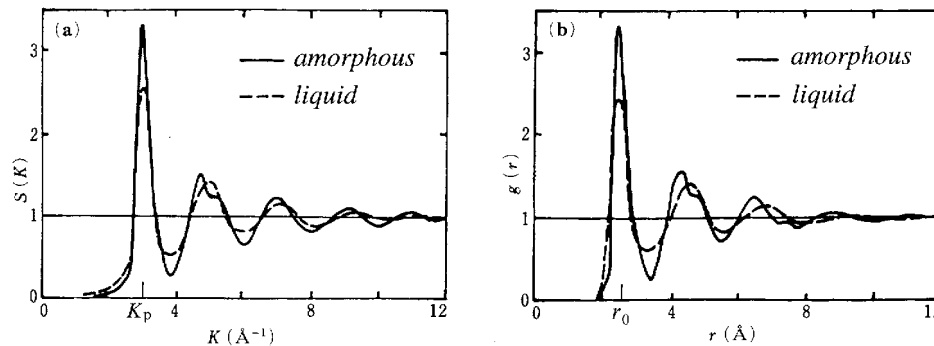


Figure 15.3. (a) Structure factor and (b) its pair distribution function of liquid and amorphous Ni.  $K_p$  refers to the wave number corresponding to the first peak of the structure factor. [Y. Waseda *et al.*, *J. Mat. Sci.* **12** (1977) 1927]

# Opór właściwy szkieł metalicznych

- ◆ Model dyfrakcyjny (Sinha 1970, Meisel i Cote 1977)
- ◆ Zależność  $\rho(T)$  – poprzez czynnik strukturalny (Nagel 1977, A. P. 1990)

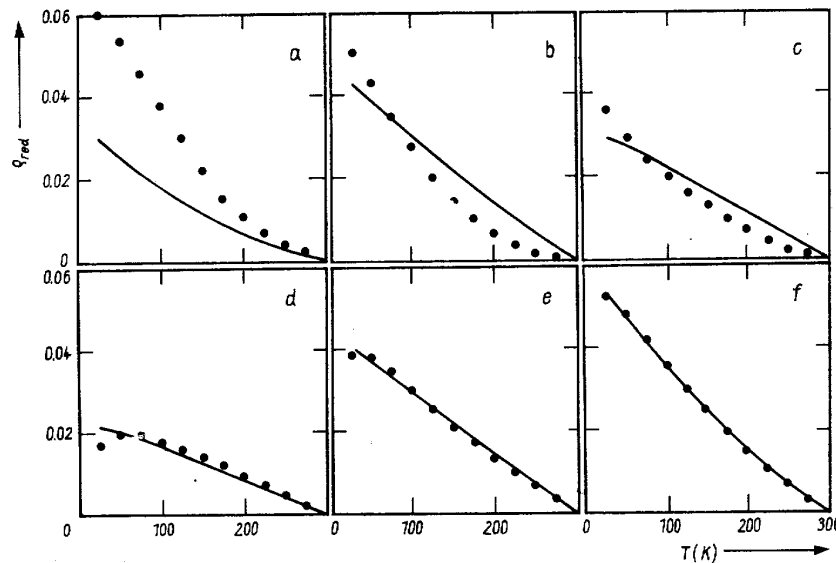


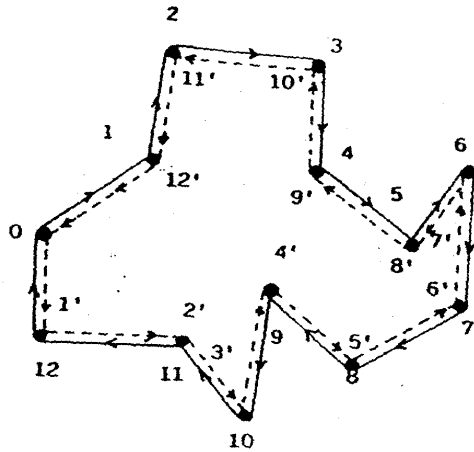
Fig. 3. Temperature dependence of the reduced resistivity  $\rho_{red}$  for various Zr concentrations  $x$ :  $x =$  a) 0.35, b) 0.40, c) 0.48, d) 0.60, e) 0.705, f) 0.75; points are experimental data after Stobiecki /16/; solid lines are theoretical curves for the values of the Debye temperature  $\theta$  given in Table 1



# Niewystarczalność modelu dyfrakcyjnego

- ◆ Nie wyjaśnia bardzo dużych wartości oporu (do  $450 \mu\Omega\text{cm}$  dla CaAl)
- ◆ Nie uwzględnia wielokrotnego rozpraszania
- ◆ Ignoruje zjawisko lokalizacji elektronów

# Interferencja kwantowa i słaba lokalizacja



Rys. 4.1. Niektóre z możliwych dróg dyfuzji elektronu przewodnictwa w dwuwymiarowym układzie nieuporządkowanym (wg [76])

## Konsekwencje:

- duża oporność elektryczna
- ujemny współczynnik temperaturowy oporu
- ujemny magnetoopór
- zmniejszenie oporu wskutek rozpraszania spin-orbita

◆ półklasycznie:

$$|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 = 2|\Psi|^2$$

◆ kwantowo:

$$|\Psi_1 + \Psi_2|^2 = 4|\Psi|^2$$

# Kwantowa teoria transportu

Morgan, Howson i Saub 1985

Klasyczne równanie transportu (r. Boltzmann)

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{dyfuzja}} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{rozpraszanie}} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{pola}} = 0$$

gdzie

$f=f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  - funkcja rozkładu,

$f=f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  - w stanach stacjonarnych.

W QM jednoczesna, dokładna znajomość  $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  – niemożliwa.

Funkcja Wignera  $\rho_w(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ :

$$\int d^3 \mathbf{k} \rho_w(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2$$

$$\int d^3 \mathbf{r} \rho_w(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = |\tilde{\Psi}(\mathbf{k})|^2$$

związek z macierzą gęstości  $\rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$

$$\mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{k}'), \quad \mathbf{Q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$$

reprezentacja Wignera:

$$\rho_w(\mathbf{R}, \mathbf{K}) = \int d^3 \mathbf{Q} \rho_{\mathbf{K} + \frac{1}{2}\mathbf{Q}, \mathbf{K} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R})$$



# Kwantowe równanie transportu w reprezentacji Wignera

$$\left( \frac{\hbar \mathbf{K}}{m} \cdot \nabla + \varepsilon \right) \rho_w(\mathbf{R}, \mathbf{K}) + \frac{2}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \text{Im}(V(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R})) \rho_w(\mathbf{R}, \mathbf{K} + \frac{1}{2} \mathbf{q}) = -e\mathbf{E} \cdot \frac{\hbar \mathbf{K}}{m} \phi(\mathbf{R}, \mathbf{K})$$

$$V(\mathbf{q}) = \int d^3 \mathbf{r} V(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}),$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_j v_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j),$$

$$\phi(\mathbf{R}, \mathbf{K}) \Leftrightarrow \frac{\partial f_0(H)}{\partial H} \quad \text{w reprezentacji Wignera}$$

## Gęstość prądu

$$\mathbf{j} = 2e \sum_{\mathbf{K}} \frac{\hbar \mathbf{K}}{m} \int d^3 \mathbf{R} \rho_w(\mathbf{R}, \mathbf{K}) = \sigma \mathbf{E}$$

pozwała w zasadzie wyliczyć  $\sigma$ .

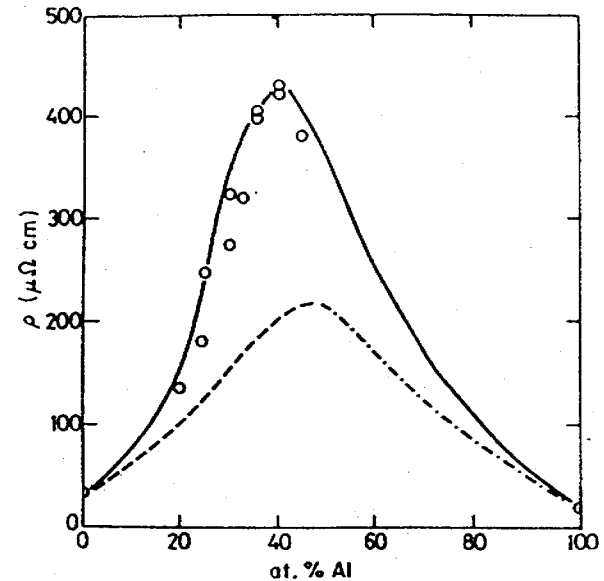
# Rozwiązanie w przybliżeniu czasu relaksacji

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_{tr}}{m}$$

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \frac{1}{\tau_{FZ}} \frac{1 + \frac{\tau_{FZ}}{2\tau} X^2 F_{MHS}^{1/2}(X)}{1 - \frac{3}{64} X^4 F_{MHS}(X)}$$

$$F_{MHS}^{1/2}(X) = \ln \left\{ \frac{\left( (1 + X^2)^{1/2} + 1 + \sqrt{2} \left[ (1 + X^2)^{1/2} + 1 \right]^{1/2} \right)}{\left( (1 + X^2)^{1/2} + 1 - \sqrt{2} \left[ (1 + X^2)^{1/2} + 1 \right]^{1/2} \right)} \right\}$$

$$X = \frac{\hbar}{\tau E_F}$$



Opór właściwy stopu  
amorficznego  $\text{Ca}_{1-x}\text{Al}_x$

# Wpływ temperatury

Howson, Paja, Morgan, Walker 1986

$$\frac{1}{\tau} \Rightarrow \frac{1}{\tau_c} = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_{in}}$$

Całki trzeba liczyć na nowo:

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \frac{1}{\tau_{FZ}} \frac{1 + \frac{\tau_{FZ}}{2\tau_c} Y^2 F_{MHP}^{1/2}(Y)}{1 - \frac{3}{64} \frac{\tau_c}{2\tau} Y^4 F_{MHS}^{1/2}(Y) F_{MHP}^{1/2}(Y)}, \quad Y = \frac{X}{1-A}, \quad A = 1 - \frac{\tau_c}{\tau}$$

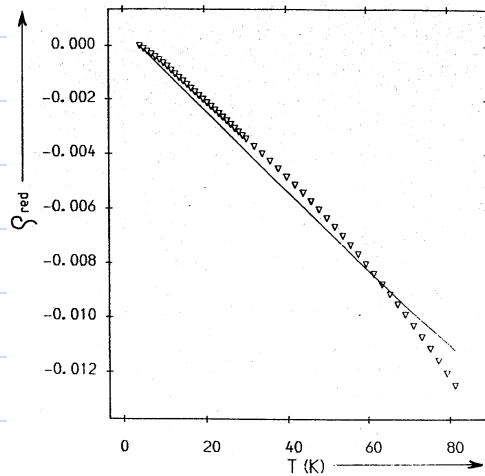
$$F_{MHP}^{1/2}(Y) = \ln \left\{ \frac{\left[ (1+Y^2)^{1/2} + 1 + \sqrt{2} \left[ (1+Y^2)^{1/2} + 1 \right]^{1/2} + 2Y \left( \frac{A}{1-A} \right)^{1/2} \left[ (1+Y^2)^{1/2} - 1 \right]^{1/2} + 2Y^2 \frac{A}{1-A} \right]}{\left[ (1+Y^2)^{1/2} + 1 - \sqrt{2} \left[ (1+Y^2)^{1/2} + 1 \right]^{1/2} + 2Y \left( \frac{A}{1-A} \right)^{1/2} \left[ (1+Y^2)^{1/2} - 1 \right]^{1/2} + 2Y^2 \frac{A}{1-A} \right]} \right\}^2$$

$$\frac{1}{\tau_{in}} = f(T)$$

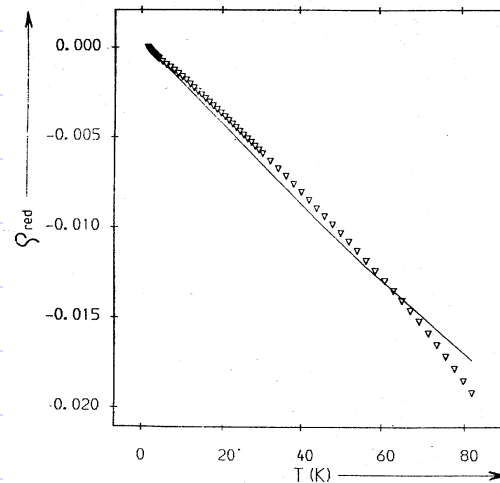
założenie:  $\frac{1}{\tau_{in}} = \beta T^2$

# Porównanie z eksperymentem

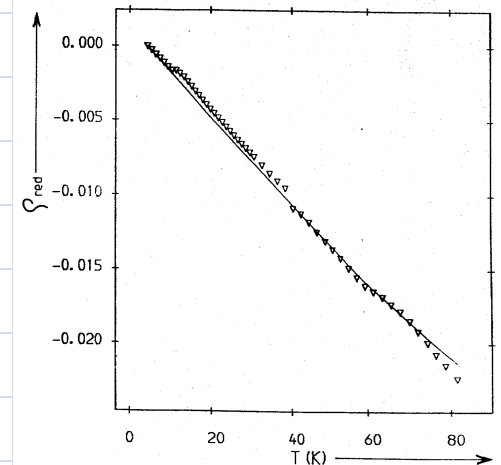
dla stopu  $\text{Ca}_{1-x}\text{Al}_x$



$x=0.3$



$x=0.35$



$x=0.5$

# Zależność oporności od pola magnetycznego (Paja i Morgan 1998)

Równanie dla swobodnej funkcji Greena w polu **B**

$$\left( \frac{\hbar \mathbf{K}}{m} \cdot \nabla + \varepsilon \right) G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}_0, \mathbf{K}, \mathbf{K}_0) + \frac{e(\hbar \mathbf{K} \times \mathbf{B})}{m\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}} G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}_0, \mathbf{K}, \mathbf{K}_0) = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}_0}$$

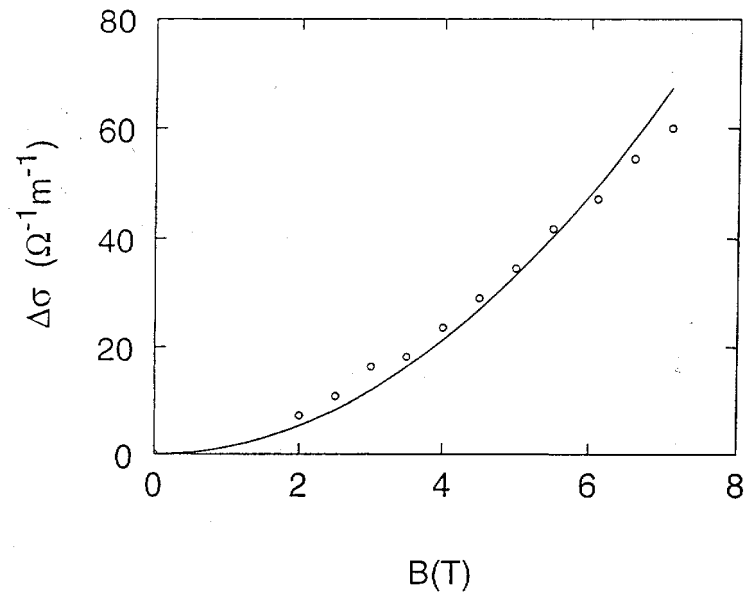
$$G(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{K}_0) \approx \exp \left[ \frac{i\hbar}{m\omega} (\mathbf{Q} \times \mathbf{K})_z \left( \frac{\omega}{\varepsilon} \right)^2 \right] \frac{\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}_0}}{\frac{i\hbar}{m} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{K} + \varepsilon}$$

Rozwiązanie w przybliżeniu czasu relaksacji

$$\frac{1}{\tau_c} = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau(\mathbf{B})} \quad \frac{1}{\tau(\mathbf{B})} = -\lambda \mathbf{B}^2$$

Wyrażenie na  $\tau_{\text{tr}}^{-1}$  takie samo, tylko A zależy od **B**

## Porównanie z doświadczeniem



Magnetoprzewodnictwo stopu  $\text{Ca}_{70}\text{Al}_{30}$  w temperaturze  $T=30\text{ K}$

# Wpływ rozpraszania spin-orbita na opór elektryczny

Hamiltonian

$$\hat{H}_{SO} = a_{SO} \mathbf{s} \cdot \mathbf{L},$$
$$a_{SO} = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{\partial V}{\partial r}$$

Element macierzowy oddziaływania z jonem wodoropodobnym

$$\langle nl | \hat{H}_{SO} | nl \rangle \propto \alpha^2 Z^4$$

Wpływ powinien być widoczny w stopach wysokooporowych z domieszką metali ciężkich, np. CuAl(Au)



# Teoria oparta na funkcji Wignera

(Spisak, Paja, Morgan 2005)

$$\rho_W(\mathbf{R}, \mathbf{K}) \Rightarrow \rho_W^{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{K})$$

$$\alpha = \uparrow, \downarrow$$

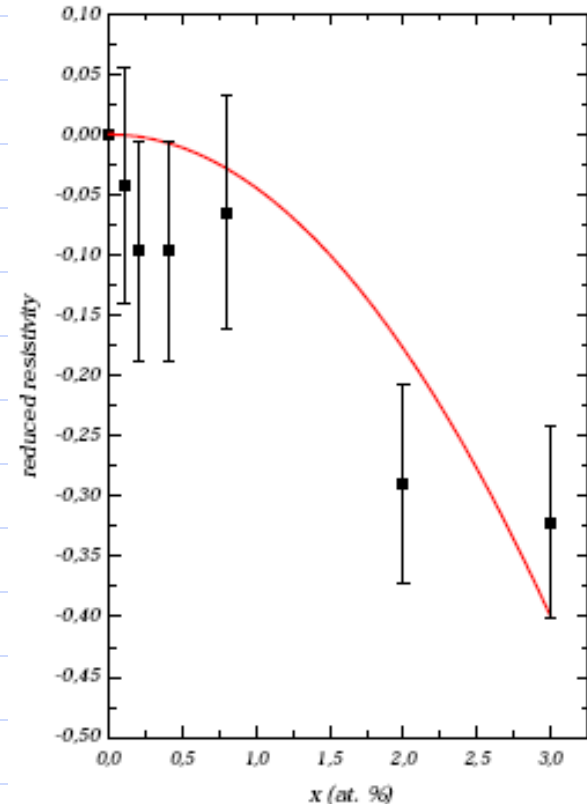
$$\beta = \uparrow, \downarrow$$

Układ 4 równań transportowych.

Wynik: zmiana oporu właściwego

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = -x^2 b_{SO}^2 K^2 K_0^2 \frac{\frac{1}{2}\tau^{-1} X^2 F_{MHS}^{\frac{1}{2}}(X)}{\tau_{FZ}^{-1} + \frac{1}{2}\tau^{-1} X^2 F_{MHS}^{\frac{1}{2}}(X)}$$

$$K_0^2 = 2\sqrt{K^4 + [2m(\hbar\tau)^{-1}]^2}$$



Względna zmiana oporu  
dla stopu  $\text{Ca}_{70}\text{Al}_{30-x}\text{Au}_x$

# Podsumowanie

- ◆ Wpływ nieporządku na opór elektryczny w ramach teorii klasycznych: opór wzrasta z nieporządkiem.
- ◆ Teza pozostaje słuszna, dopóki nieporządek jest mały i możemy stosować opis quasiklasyczny.
- ◆ Mały nieporządek + oddziaływanie spin-spin = minimum oporności.
- ◆ Duży nieporządek (materiały amorficzne)  $\Rightarrow$  QI  $\Rightarrow$  słaba lokalizacja  $\Rightarrow$  duży opór.
- ◆ Duży nieporządek + czynnik zaburzający QI (drgania termiczne, pole magnetyczne, oddziaływanie spin-orbita) = zmniejszenie oporu.

# Dziękuję za uwagę.





Tabela 4. Wyniki obliczeń czasów relaksacji w stopach CaAl

stop	$\rho_0^{\text{exp}}$ ( $\mu\Omega\text{cm}$ )	$\beta$ ( $10^7 \text{s}^{-1} \text{K}^{-2}$ )	$\tau_{in}$ ( $10^{-12} \text{s}$ )	$\tau$ ( $10^{-16} \text{s}$ )
Ca <sub>70</sub> Al <sub>30</sub>	245	3.22	4.84	2.61
Ca <sub>65</sub> Al <sub>35</sub>	400	2.44	6.41	2.21
Ca <sub>50</sub> Al <sub>50</sub>	355	2.17	7.19	2.06

$\beta$  - parametr zdefiniowany równaniem (5.32)

$\rho_0^{\text{exp}}$  - oporność mierzona w  $T_{min}$

$\tau_{in}$  - nieelastyczny czas relaksacji w temperaturze 80 K

$\tau$  - elastyczny czas relaksacji

# Influence of spin-orbit scattering on the magnetoresistance due to enhanced electron-electron interactions

A. Sahnoune, J. O. Ström-Olsen, and H. E. Fischer

PHYSICAL REVIEW B

VOLUME 46, NUMBER 16

15 OCTOBER 1992-II

TABLE I. Physical parameters of Ca-Al- $X$  ( $X = \text{Ag}, \text{Au}$ ) amorphous alloys.

Alloy	$d$ (g/cm <sup>3</sup> )	$\rho$ ( $\mu\Omega$ cm)	$D$ (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	$1/\tau_{\text{so}}$ (10 <sup>11</sup> s <sup>-1</sup> )	$\bar{F}_\sigma^a$	$\bar{F}_\sigma^b$
Ca <sub>70</sub> Al <sub>30</sub>	1.85±0.04	310±16	1.5	0.82±0.1	0.556±0.05	0.18±0.02
Ca <sub>70</sub> Al <sub>29.7</sub> Ag <sub>0.3</sub>	1.84±0.04	264±13	1.8	1.64±0.1	0.47±0.04	0.22±0.03
Ca <sub>70</sub> Al <sub>29.3</sub> Ag <sub>0.7</sub>	1.88±0.04	270±13	1.7	2.31±0.15	0.397±0.04	0.19±0.03
Ca <sub>70</sub> Al <sub>28</sub> Ag <sub>2</sub>	1.92±0.04	245±12	1.94	5.48±0.5	0.244±0.03	0.08±0.02
Ca <sub>70</sub> Al <sub>29.9</sub> Au <sub>0.1</sub>	1.86±0.04	297±15	1.56	6.28±1.0	0.185±0.02	0.015±0.02
Ca <sub>70</sub> Al <sub>29.8</sub> Au <sub>0.2</sub>	1.86±0.04	280±14	1.66	13.1±2	0.10±0.02	0.01±0.02
Ca <sub>70</sub> Al <sub>29.6</sub> Au <sub>0.4</sub>	1.87±0.04	280±14	1.66	24.2±4.0	0.075±0.02	-0.084±0.02
Ca <sub>70</sub> Al <sub>29.2</sub> Au <sub>0.8</sub>	1.92±0.04	290±15	1.6	48.6±10	0.015±0.02	-0.081±0.02
Ca <sub>70</sub> Al <sub>28</sub> Au <sub>2</sub>	2.00±0.04	220±14	2.1	70.5±15.0	0.0±0.02	-0.106±0.02
Ca <sub>70</sub> Al <sub>27</sub> Au <sub>3</sub>	2.12±0.04	210±14	2.27	152±35.0	0.0±0.02	-0.246±0.02

<sup>a</sup>From magnetoresistance.

<sup>b</sup>From the temperature dependence of the resistivity.