

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ

На правах рукопису

ЄВЛАШИНА Марина Леонідівна

УДК 538.915

ВПЛИВ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ПОБЛИЗУ РІВНЯ ФЕРМІ
НА КІНЕТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТА СТІЙКІСТЬ ФАЗ
ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ ТА ЇХНІХ СПЛАВІВ

Спеціальність 01.04.13. - фізика металів

Автореферат
дисертації на здобуття вченого ступеня кандидата
фізико-математичних наук



Київ - 1996

ДВ 34,630

Дисертація є рукопис.

Роботу виконано в Інституті металофізики НАН України

Науковий керівник	доктор фізико-математичних наук професор Антонов В.М.
Офіційні опоненти:	доктор фізико-математичних наук пр.н.с. ДонФТІ НАН України Шаталов В.М. кандідат фізико-математичних наук ст.н.с. Інституту Магнетизму НАН України Журавльов А.Ф.
Провідна організація	Інститут Фізики НАН України м.Київ

ЛНБ України ім.В. Стефаніка

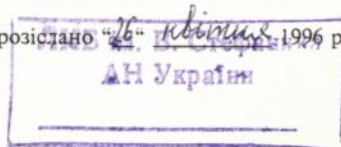


00754415 (Q)

Захист дисертації відбудеться 29 травня 1996 р. о 14 год.
на засіданні спеціалізованої ради Д 01.75.01 при Інституті металофізики
НАН України за адресою: 252142 Київ, бульв.Вернадського, 36

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці ІМФ НАН України.
Відгуки на автореферат у двох примірниках, завірених печаткою установи,
прохання надсилати за вказаною адресою.

Автореферат розіслано 26 квітня 1996 р.



Вчений секретар спеціалізованої ради Д 01.75.01

доктор фізико-математичних наук

В.М. Пилип

Пишак В.К.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Одна з головних задач фізики твердого тіла полягає в побудуванні 'з перших принципів' мікроскопічної теорії властивостей кристалів. Для вирішення цієї задачі необхідне детальне дослідження енергетичної зонної структури. Загальним підходом до дослідження властивостей багатоелектронних систем є теорія функціоналу електронної густини (ТФГ). Згідно з цією теорією усі властивості основного стану багатоелектронної системи (такі як енергія зв'язку, пружні властивості, рівноважний параметр ґратки, поверхня Фермі) можуть бути описані за допомогою деякого функціоналу, що залежить лише від розподілу електронної густини в системі. Для глибокого розуміння властивостей складних речовин та узагальнення отриманих експериментальних даних необхідно встановити зв'язок між електронною структурою та різноманітними фізичними ефектами. Велика кількість практично важливих характеристик металів та сплавів - електропровідність, температура переходу у надпровідний стан, поглинання ультразвуку - значною мірою визначаються структурою поверхні Фермі та електрон-фононою взаємодією. На теперешній час відсутнє чітке розуміння ступеню впливу структури поверхні Фермі (ПФ) та характеру поведінки хвильової функції електрону на ПФ на електрон-фононну взаємодію (ЕФВ) та електроопір в конкретних об'єктах. Рівень точності, досягнутий у ряді робіт, де описано температурну залежність фононного електроопору при температурах нижче 300К, не є задовільним. В ряді робіт встановлена велика чутливість ряду

кінетичних характеристик (термоЕРС, електроопір) до топологічного фазового переходу $2\ 1/2$ роду.

Ця робота присвячена дослідженню просторової анізотропії ЕФВ, впливу непружності електрон-фононного розсіювання на фононний електроопір та вивченню особливостей електронного спектру поблизу рівня Фермі, які відповідають за топологічний перехід поверхні Фермі внаслідок зміни температури.

Мета роботи - теоретичний опис електронної структури та встановлення її зв'язку з різними електронними властивостями перехідних металів (Au, Ag, Pt, Cu, Pd, W, Ta, Ir, Rh, Ti) та сплавів (Nb_3Sn и $ZrCu$).

Наукова новизна.

В результаті проведених досліджень вперше:

- розроблено метод для визначення внеску окремих фрагментів поверхні Фермі в електрон-фононну взаємодію;
- показано, що повне урахування непружності електрон-фононної взаємодії в релятивістському наближенні суттєво підвищує точність опису електроопору 5d-металів при низьких температурах;
- були отримані співвідношення, які дозволяють оцінити внесок від особливих ділянок електронного спектру у зміну повної енергії кристалу при деформації;

Наукова і практична цінність.

Проведені дослідження надають нову інформацію про вплив особливостей електронної структури на кінетичні характеристики перехідних металів та їхніх сплавів, що вивчалися.

В результаті проведених досліджень:

- визначено внесок в електрон-фононну взаємодію від електронних станів на різних листах поверхні Фермі в Pt, W, Ta, Ir;
- встановлено, що опис фононного електроопору в перехідних металах при низьких температурах суттєво покращується, якщо взяти до уваги непружність розсіювання в інтегралі зіткнень;
- визначено особливості електронного спектру в Ti та Nb₃Sn, які відповідають за топологічний перехід поверхні Фермі внаслідок зміни температури;

Наукові положення, що винесено на захист:

1. Як величина, так і анізотропія електрон-фононної взаємодії в ГЦК-металах (Pt, Ir), що вивчалися, зумовлені, головним чином, внутрилистним df -розсіюванням на листах поверхні Фермі, які мають високу густину d -станів (Γ_6 - Ir, W_h - Pt). Найбільш суттєвий внесок pd -розсіювання має місце для еліпсоїдів поверхні Фермі, локалізованих поблизу грані зони Бріллюена. Анізотропія електрон-фононної взаємодії в ОЦК-металах (W, Ta), що вивчалися, визначається міжлистним pd -розсіюванням на еліпсоїдах поверхні Фермі. Для жодного з металів, що вивчалися, sp -внесок в електрон-фононну взаємодію не грає якоїсь помітної ролі.

2. Опис фононного електроопору в перехідних металах при низьких температурах суттєво покращується, якщо взяти до уваги непружність розсіювання в інтегралі зіткнень.

3. У Nb₃Sn поблизу температури мартенситного переходу має місце зміна топології поверхні Фермі в кубічній фазі внаслідок

розриву перемички між двома дірковими поверхнями в напрямку RM , та в тетрагональній фазі в наслідок формування перемичок між двома дірковими поверхнями в напрямках RA та AM .

Поблизу температури мартеситного переходу в ГЦУ-фазі Ti має місце зміна топології поверхні Фермі внаслідок розриву перемички між двома дірковими поверхнями, що центровані в точках Γ та A вздовж напрямку $[0001]$.

Особистий внесок автора.

Автором розроблено методику розрахунку величини параметру Хопфельда в наближенні Хопфельда-МакМіллана, яка дозволяє розділити внески від різних листів поверхні Фермі.

На основі релятивістського узагальнення методу Аллена, в явному вигляді отримано температурну залежність фононного електроопору. Розраховано електроопір для $5d$ -металів і проведено порівняння з експериментальними даними.

Отримано співвідношення для оцінки внеску від 'особливої' ділянки електронного спектру при деформації, що знижує симетрію точкової групи кристалу.

Розраховано електронну структуру та повну густину станів та проаналізовано особливості електронного спектру Ti , Nb_3Sn , $ZrCu$.

Апробація роботи.

Матеріали дисертації доповідалися і обговорювалися на:

1. Dynamical Properties of Solids: Lattice Dynamics in III Ordered Systems (Shallerhau, Germany, September 1992)

2. International Conference on electronic structure and properties of transition metals and alloys (Shallerhau, Germany, March 1993)
3. Спільний українсько-французький семінар із статистичної фізики і теорії конденсованих систем (Львів, лютий 1993)
4. Семінар Інституту М.Планка (Штутгарт, Німеччина, травень 1994)
5. Семінар Дрезденського Технічного Університету (Дрезден, Німеччина, лютий 1995)

Структура і обсяг роботи.

Дисертація складається з вступу, трьох глав і закінчення, містить 18 малюнків, 1 таблицю, список літератури з 122 назв, тексту -100 сторінок.

Публікації.

За матеріалами дисертації опубліковано 7 статей. Перелік публікацій приведено у кінці автореферату.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовується актуальність теми, визначено ціль і задачі, що підлягають вирішенню в дисертації, виділено основні результати, отримані в ході дослідження, їх новизну і практичну цінність.

В першій главі наведено методологію побудування поверхні Фермі та електронного спектру поблизу рівня Фермі, що використовувалася при розрахунках, обговорюється можливість використання релятивістських методів приєднаних плоских хвиль (ППХ) та лінійних muffin-tin орбіталей (ЛМТО) для вирішення задач, що поставлені, та питання точності розрахунків.

Друга глава є центральною. В розділі 2.1 на прикладі золота досліджено спектральну функцію електрон-фононої взаємодії. Було використано методику, що полягає в двократному інтегруванні по поверхні Фермі, що розраховувалась 'з перших принципів' з використанням методу релятивістських приєднаних плоских хвиль (РППХ). Матричний елемент ЕФВ було побудовано на базисі РППХ в наближенні жорсткого зсуву МТ-розсіювача.

$$\alpha_{\mathbf{k}}^2(\omega)F(\omega) = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{v}} \int_{S_F} \frac{ds_{\mathbf{k}'}}{|V_{\mathbf{k}'}|} |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{v}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\mathbf{v}} - \omega) \quad (1)$$

$$\alpha^2(\omega)F(\omega) = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{S_F} \frac{ds_{\mathbf{k}}}{|V_{\mathbf{k}}|} \alpha_{\mathbf{k}}^2(\omega)F(\omega) \quad (2)$$

Наведено результати розрахунку локальних спектральних функцій для $\alpha_{\mathbf{k}}^2(\omega)F(\omega)$ для $\mathbf{k} \parallel [100]$, $\mathbf{k} \parallel [110]$ і $\mathbf{k} \parallel [111]$ та $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ разом з результатами розрахунку $F_{FS}(\omega)$, що відповідає постійному матричному елементу $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{v}}$. $F_{FS}(\omega)$ є функцією спектральної густини фононів з урахуванням реальної геометрії ПФ. Порівняння $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ та $F_{FS}(\omega)$ показало, що при електрон-фононній взаємодії імовірність поглинання або випускання фонону для різних частот нерівноімовірна та буде залежати від топології ПФ. З порівняння $\alpha^2(\omega)F(\omega)$, $F_{FS}(\omega)$ та $\alpha_{\mathbf{k}}^2(\omega)F(\omega)$ зроблено висновок, що різкий максимум $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ при 12-15 меВ зумовлений структурою ПФ, а не анізотропією матричного елементу $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{v}}$, та що цей максимум на

$F_{FS}(\omega)$, головним чином, формується електронними станами поблизу напрямку [100].

В розділі 2.2 наведено результати дослідження внесків від різних листів поверхні Фермі в параметр Хопфельда в Pt, Ta, W, Ir та встановлено причину анізотропії константи електрон-фононного зв'язку λ . У випадку золота було показано, що величини λ , отримані шляхом інтегрування спектральної функції та з використанням наближення Хопфельда-МакМіллана, співпадають. Тому, з метою прискорення розрахунків, в подальшому було використано наближення Хопфельда-МакМіллана.

Показано (Таб.1), що константа електрон-фононного зв'язку λ_{sp}^L у платині фактично ізотропна. Електрон-фононна взаємодія для листа W_h поверхні Фермі, головним чином, визначається df-внеском, у той час як для еліпсоїдів та електронного листа Ge потрібно враховувати також і pd-внесок до параметру Хопфельда. Роль цього внеску зростає при переході до еліпсоїдів поверхні Фермі.

Для вольфраму λ також фактично ізотропна. Це пов'язано з тим, що анізотропія pd та df-внесків в параметр Хопфельду η компенсується.

Для Ta λ суттєво анізотропна. Причина цього полягає в тому, що при переході від 'гумових джунглів' JG до еліпсоїдів ПФ спостерігається різка анізотропія pd-внеску в η . На відміну від вольфраму, зменшення η_{df} на еліпсоїдах ПФ танталу вже не компенсує збільшення η_{pd} , наслідком чого є суттєве зростання λ_{sp}^L

Таблиця 1. Параметр Хопфельду (ат.од.) та константа електрон-фононного зв'язку для різних листів поверхні Фермі.

Елемент	Лист пов-ні	$\eta_{sp}^L \cdot 10$	$\eta_{pd}^L \cdot 10^3$	$\eta_{df}^L \cdot 10^3$	$\eta^L \cdot 10^3$	λ_{ep}^L
Pt	Γ_6	0.03	11.41	63.535	75.032	0.469
	W_h	0	3.10	69.844	72.946	0.465
	E1	0.02	15.73	65.086	80.786	0.505
	Σ	0.01	5.33	68.305	73.646	0.460
W	Je	0.08	7.62	73.47	81.17	0.223
	oct.	2.16	11.47	71.22	84.85	0.233
	E1	0.39	97.68	6.54	104.61	0.287
	Σ	0.45	24.61	60.93	85.99	0.236
Ta	oct.	0.08	8.67	93.48	102.23	0.547
	JG	0.34	14.79	91.08	106.22	0.568
	E1	1.97	151.28	40.94	194.202	1.038
	Σ	0.76	53.12	77.04	130.912	0.700
Ir	Γ_6	0.11	6.51	106.32	112.94	0.236
	Γ_5	0.05	5.44	114.57	120.07	0.252
	X_3	0.08	10.60	113.04	123.72	0.235
	X_4	0.20	23.75	100.13	124.084	0.261
	Σ	0.08	7.89	111.11	119.08	0.250

на еліпсоїдах у порівнянні з внесками від нецентральної поверхні Фермі. Pd-внесок в η^L для еліпсоїдів зумовлено, головним чином, міжлістною взаємодією р-станів на цих листах ПФ з d-станами на 'гумових джунглях', що в свою чергу пов'язано з високою густиною р-станів на еліпсоїдах та d- на JG листі поверхні Фермі.

Анізотропія λ для Ir зумовлена зростанням df-внеску в η^L при переході Γ_6 до Γ_5 . На відміну від електронних листів анізотропія електрон-фононої взаємодії для діркових еліпсоїдів ПФ іридію зумовлена не лише df, але й pd-розсіюванням.

Розділ 2.3 присвячено методу розрахунку фононного електроопору. Електроопір порівняно легко виміряти, але його розрахунок викликає великі труднощі. Метод розрахунку фононного опору, запропонований Алленом в нерелятивістському наближенні, ґрунтується на розкладі інтегралу зіткнень в рівнянні Больцмана в ряд по базису ортогональних енергетичних поліномів $\sigma_n(E)$ та Fermi surface-гармонік ($F_J(\mathbf{k})$).

В рамках цього підходу урахування анізотропії ПФ здійснюється за рахунок підсумування по $F_J(\mathbf{k})$, а урахування непружності ЕФВ за рахунок підсумування по енергетичним поліномам $\sigma_n(E)$. В роботі здійснено релятивістське узагальнення цього методу, що дозволило вперше провести розрахунки електроопору для 5d-металів (Au, Pt, W, Ta, Pd, Rh, Ag, Cu та Ir). Отримано вираз для електроопору, що містить температурну залежність в явному вигляді:

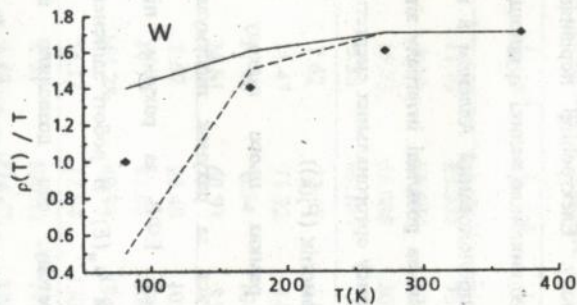
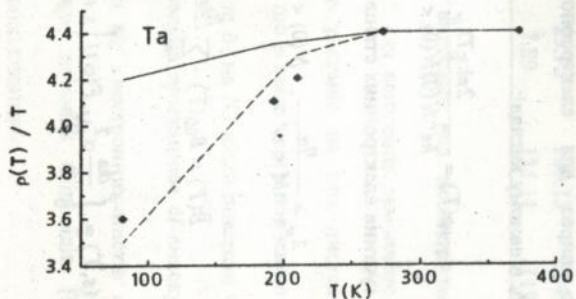
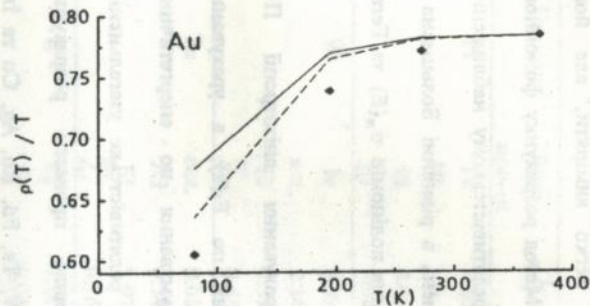
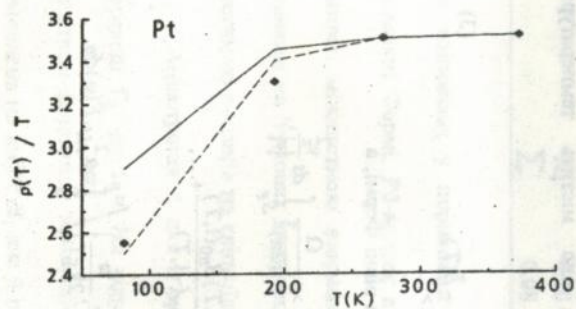
$$\rho(T) = \frac{2\pi k_B T \lambda_{ir}}{\hbar e^2 N(0) N(0) < v_z^2 >} \bar{B}(T), \quad (3)$$

де $N(0)$ - густина електронних станів на рівні Фермі, а

$$\lambda_{ir} = \frac{\eta_{ir}}{M < \omega^2 >}, \quad N(0) < v_z^2 > = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{S_F} ds \frac{v_z^2}{|v|},$$

$$\bar{B}(T) = B_{00}(T) - \sum_n \frac{B_{0n}(1, T) B_{n0}(1, T)}{B_{nn}(-1, T)} + \dots,$$

$$B_{nn'}(s, T) = \int_0^p \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{sJJ'}^2 F(\omega) I\left(s, n, n', \frac{\omega}{2k_B T}\right) \Big/ \int_0^p \omega \alpha_{sJJ'}^2 F(\omega) d\omega.$$



Мал.1 $\rho(T)/T$ (K) 10^{-8} Ом \times см \times K $^{-1}$, _____ - теорія $n=2$, - - - - - теорія $n=6$, ромб - експеримент

Під час розрахунків для конкретних металів замість спектральної функції $\alpha_{JJ}^2 F(\omega)$ було використано мікроконтактну спектральну функцію ЕФВ, що отримана з експерименту. На Мал.1 для порівняння наведено результати розрахунків електроопору для Au, Pt, Ta, W при підсумуванні по енергетичним поліномам до $n=2$ та $n=6$. Видно, що врахування додаткових членів при підсумуванні дозволило суттєво покращити співпадання теорії та експерименту при температурах нижче за 200K.

В третій главі наводяться результати дослідження об'єктів, що мають особливості електронної структури поблизу рівня Фермі.

В розділі 3.1 проаналізовано, як змінюється внесок ϵ від особливої ділянки енергетичної зони (точки нульової дисперсії електронів $|dE(k_0)/dk| = 0$ поблизу рівня Фермі) в повну енергію кристалу із збільшенням деформації при фіксованій температурі.

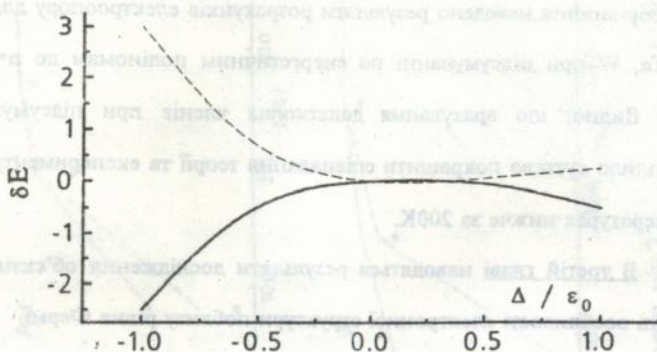
$$\delta E = \int \epsilon \delta N(\epsilon) / [1 + \exp(\epsilon / T)] d\epsilon \quad (7)$$

$$\delta N(\epsilon) = \frac{1}{2} n_0 [\delta(\epsilon - \epsilon_0 - \Delta) + \delta(\epsilon - \epsilon_0 + \Delta)] \quad (8)$$

де n_0 та ϵ_0 - енергія та густина станів, що відповідають дну (верхівці) зони, 2Δ - величина розщеплення 'особливої' ділянки при деформації.

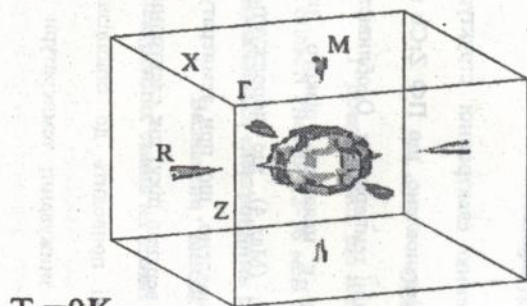
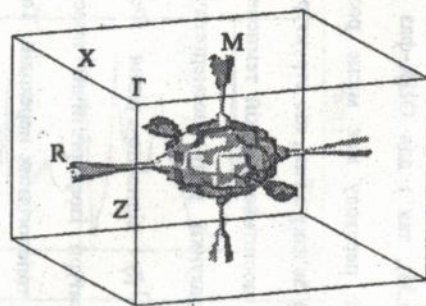
Показано, що як при додатньому, так і при від'ємному ϵ_0 для електронної зони збільшення деформації призводить до зменшення повної енергії кристалу за рахунок цієї ділянки спектру (Мал.2). Це призводить до пом'якшення модулів пружності g , як наслідок, до нестійкості кристалу відносно деформації. Якщо верхівка діркової

зони наближається до рівня Фермі, то при збільшенні деформації повна енергія зростає, тобто має місце стабілізація кристалу відносно деформації

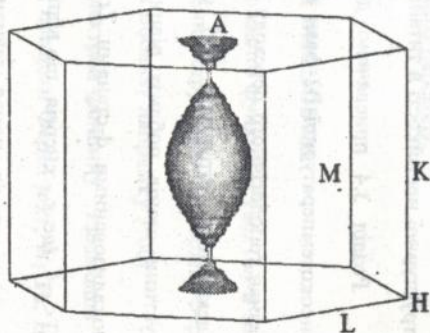


Мал.2 Внесок особливої ділянки електронного спектру в загальну енергію деформованого кристалу. _____ - електронна зона, - - - - - діркова зона.

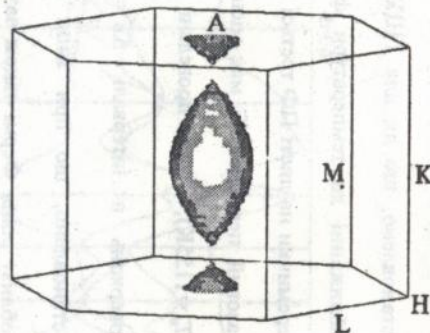
Розділ 3.2 присвячено дослідженню електронної структури кубічної та тетрагональної фаз Nb_3Sn . Усі розрахунки в цій частині роботи здійснювалися лінійним методом МТ-орбіталей (ЛМТО) в скалярно-релятивістському наближенні з урахуванням комбінованих поправок. Залежність від температури моделювалася зміною параметра ґратки у відповідності з експериментальними даними. Розрахунки показують, що наближення до температури мартенситного претворення T_m як в тетрагональній (Мал.3а), так і в кубічній фазах Nb_3Sn призводить до топологічного переходу поверхні Фермі, утвореної 17-ю енергетичною зоною, що може бути причиною


 $T_2=0K$


а)

 $T_1=T_m$


б)



Мал.3 Зміна топології поверхні Фермі

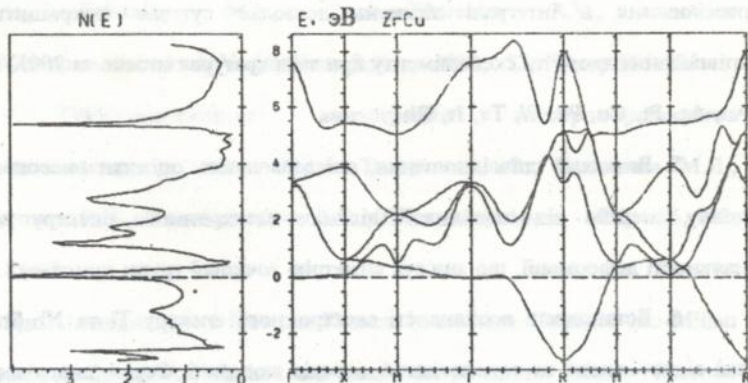
а)тетрагональна фаза Nb₃Sn б) ГЦУ - фаза Ti.

пом'якшення модулів пружності і, як наслідок, структурної нестійкості.

В розділі 3.3 розглянуто електронну структуру титану. Встановлено, що як для ГЦУ (Мал.36), так і для ОЦК-фаз при наближенні до температури фазового переходу має місце розрив перемички на листі ПФ третьої зони. У зв'язку з тим, що структурний фазовий перехід в Ті має місце при достатньо високій температурі ($T_m=1155\text{K}$), були проведені розрахунки ряду ізоенергетичних поверхонь в інтервалі $\Delta E = \pm 1 \cdot 10^{-3} \text{ Ry}$ відносно рівня Фермі. Встановлено, що при зміні температури ізоенергетичні поверхні поблизу рівня Фермі також зазнають топологічних переходів. Таким чином, при наближенні до температури структурного фазового переходу як в ГЦУ, так і в ОЦК-фазах титану має місце зміна топології ізоенергетичних поверхонь, що може призводити до структурної нестійкості в титані.

Розділ 3.4 присвячено дослідженню електронної структури високотемпературної В2-фази ZrCu . Встановлено, що ПФ ZrCu не зазнає топологічного переходу при зміні температури. Особливістю електронної структури цієї сполуки є наявність різкого піку густини станів поблизу рівня Фермі (Мал.4), що породжується локалізованими d-станами Zr. Встановлено, що при температурі ($T < \epsilon_0$), (де ϵ_0 - енергія, що відповідає верхівці піку) пік електронної густини станів понад рівнем Фермі приводить до стабілізації кристалу відносно деформації. При знижуванні температури до

температури маргенситного переходу стабілізаційний ефект цього піку зменшується, що може бути причиною структурної нестійкості в ZrCu.



Мал.4 Енергетичні зони 8-10 і електронна густина станів $N(E)$ (електрон/атом·eВ) ZrCu для параметрів ґратки, що відповідають температурі фазового переходу.

ОСНОВНІ ВИСНОВКИ:

1. Встановлено, що пік спектральної функції $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ в золоті в області енергій 12-16 меВ зумовлений структурою поверхні Фермі і визначається електронними станами поблизу напрямку [100].
2. Визначено внесок в електрон-фононну взаємодію від електронних станів на різних листах поверхні Фермі в Pt, W, Ta, Ir.

3. Запропоновано релятивістське узагальнення методу розрахунку фононного електроопору, що дозволило вперше провести кількісні розрахунки електроопору для 5d-металів.

4. Показано, що врахування непружності електрон-фононного розсіювання в інтегралі зіткнень дозволяє суттєво покращити співпадання теорії та експерименту при температурах нижче за 200K в Au, Ag, Pt, Cu, Pd, W, Ta, Ir, Rh.

5. Виведено співвідношення, які дозволяють оцінити внесок в повну енергію від 'особливої' ділянки електронного спектру за наявності деформації, що знижує симетрію точкової групи кристалу.

6. Встановлені особливості електронного спектру Ti та Nb₃Sn, які відповідають за топологічний перехід поверхні Фермі внаслідок зміни температури.

7. Встановлено, що наявність піка електронної густоти станів поблизу рівня Фермі в високотемпературній B2-фазі ZrCu при охолодженні приводить до структурної нестійкості.

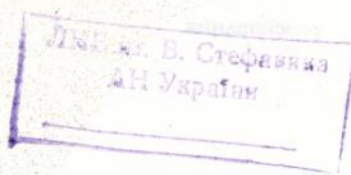
ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ДИСЕРТАЦІЇ ОПУБЛІКОВАНО В

РОБОТАХ

1. Простой метод расчета температурной зависимости фононного электросопротивления. Евлашина М.Л., Жалко-Титаренко А.В., Мильман В.Ю., Немощкаленко В.В. //Металлофизика,-1990, 12, N1, - с.110-113.

2. Евлашина М.Л., Жалко-Титаренко А.В. Влияние неупругости электрон-фононного рассеяния на температурную зависимость

- фононного электросопротивления переходных металлов. //Металлофизика, -1991, -13, N8, -с.88-92.
3. Theoretical study of lattice heat capacity, thermal expansion and phonon-limited resistivity of transition metals. Milman V.Yu., Grishenko T.A., Evlashina M.L., Zhalko-Titarenko A.V., Antonov V.V., Nemoshkalenko V.V. //J.Chem.Solids, -1992, -53, N4, -p.565-575.
4. Пространственная анизотропия электрон-фононного взаимодействия в золоте. Жалко-Титаренко А.В., Евлашина М.Л., Антонов В.Н., Немошкालенко В.В. //Металлофизика, -1993, -15, N1, -с.85-87.
5. Spatial Anisotropy of Electron-Phonon Interaction. Hopfield-Mc-Millan Approach Calculation Method and Results for 5d-metals. Zhalko-Titarenko A.V., Yevlashina M.L., Antonov V.V., Nemoshkalenko V.V. //Phys.Stat.Solidi(b), -1993, -175, N2, -p.389-394.
6. Electronic and cristal structure of ZrCu Intermetallic Compound Close to the Point of the Structural Transformation. Zhalko-Titarenko A.V., Yevlashina M.L., Antonov V.V., Yavorskii B.Yu., Koval Yu.N., Firstov G.S. //Phys.Stat.Solidi(b), -1994, -184, N1, -p.121-127.
7. Электронная структура титана вблизи точки структурного фазового превращения. Жалко-Титаренко А.В., Евлашина М.Л., Перлов А.Я., Яворский Б.Ю. //ФНТ, -1995, -21, N5, -с.553-558.



Евлашина М.Л. Влияние электронной структуры вблизи уровня Ферми на кинетические характеристики и устойчивость фаз переходных металлов и их сплавов.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.13 - физика металлов. Институт металлофизики НАН Украины, Киев 1996.

Защищаются 7 научных работ, которые содержат результаты расчетов характеристик электронных состояний на поверхности Ферми и температурной зависимости фононного электросопротивления в ряде переходных 5d-металлов. С использованием метода линейных muffin-tin орбиталей рассчитана электронная структура и проанализированы ее особенности в Ti, ZrCu, Nb₃Sn.

Yevlashina M.L. Influence of electron structure near Fermi level on kinetic characteristics and phase stability of transition metals and their compounds.

Thesis applied for a degree of PhD, speciality 01.04.13. - Physics of metal. Institute of Metal Physics NAS of Ukraine, Kiev 1996.

7 scientific works are defended which contain results of calculations electron states characteristics on sheets of Fermi surface and temperature dependence of phonon electroresistance in 5d-metals. The linear muffin-tin orbital method (LMTO) for calculation of electron structure was employed. Electron structure peculiarities in Ti, ZrCu, Nb₃Sn was investigated.

Ключові слова: електронна структура, електроопір, поверхня Фермі, топологічний перехід, непружність електрон-фононного розсіювання.

1

13.04.1996 р. Формат 60x84 1/16, Об'єм 1,1 друк.арк., Замовл. 36, Тираж 100 екз.

Надруковано в ІМФ НАН України, 252680, Київ-142, бульв. ак. Вернадського 36

146600

AB 34.638

AB 34.638