

УДК 537. 312 536.2.

**ВЛИЯНИЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА НА ПОДВИЖНОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В МО И СПЛАВАХ МО - RE****Т.А. Игнатъева, А.Н. Великодний***Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»  
ул. Академическая, 1, Харьков, 61108, Украина**e-mail: [taignatieva@mail.ru](mailto:taignatieva@mail.ru)*

Received 25 December 2011, accepted 20 February 2012

Используя экспериментальные результаты по эффекту Холла для Мо и сплавов Мо-Re,[1] рассчитана температурная зависимость подвижности электронов. Результаты рассматриваются с учетом критических энергий электронного спектра Мо. Показано, что температуру  $\sim 50\text{K}$  можно сопоставить с краем подвижности локализованных электронов на краю спектра в узком интервале энергий: от критических энергий - зарождения малых электронных групп до энергии активации, когда электроны делокализуются. Для Мо – это  $\epsilon_{C1}$  энергия зарождения малой электронной линзы ниже уровня Ферми и  $\epsilon_{C2}$  энергия выше уровня Ферми, при которой появляется новая электронная полость поверхности Ферми под действием примеси Re. Приведенные результаты свидетельствуют о том, что движение уровня Ферми под влиянием внешних воздействий относительно критических энергий электронного спектра приводит к электронно-топологическим переходам, которые одновременно имеют признаки переходов металл-диэлектрик.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** подвижность электронов, критические энергии электронного спектра, край подвижности, электронно-топологический переход, локализация электронов.

**INFLUENCE OF THE ELECTRONIC SPECTRUM FEATURES ON THE ELECTRON MOBILITY OF MO AND MO - RE ALLOY**

T.A. Ignatyeva, A.N. Velikodnyy

*National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology"  
Academichna str. 1, Kharkiv, 61108*

The of electrons mobilities adjusted for critical experimental results of the Mo and Mo-Re alloys Hall effect measurements [1] were used for the calculation temperature dependence energy of the Mo electronic spectrum. It was shown that the temperature of 50K could be related to the mobility edge of localized electron states at the spectrum edge in narrow energy interval; from critical energies, when generation of the small electronic groups took place, to activation energy attributed to electron delocalization. In the case of Mo - there are  $\epsilon_{C1}$  energy of the generation of small electronic lens below Fermi level and  $\epsilon_{C2}$  energy above Fermi level, which accompanied by the formation of new electronic cavity of the Fermi surfaces under Re doping. In summary, Fermi level movement, under external impact in relation to the critical energy of electron spectrum, led to electronic-topological transitions which simultaneously have the features of metal-dielectric transitions.

**THE KEY WORD:** mobility electron, critical energies of the electronic spectrum, edge to mobilities, electronic- -topological transition, electron localization.

**ВПЛИВ ТОНКОЇ СТРУКТУРИ ЕЛЕКТРОННОГО СПЕКТРУ НА РУХОМІСТЬ ЕЛЕКТРОНІВ В МО ТА СПЛАВАХ МО - RE****Т.О. Ігнатъєва, О.Н. Великодний***Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»,  
вул. Академічна 1, Харків, 61108, Україна*

За експериментальними результатами ефекту Холла для Мо та сплавів Мо-Re [1], розрахована температурна залежність рухомості електронів. Результати аналізуються з врахуванням критичних енергій електронного спектру Мо. Показано, що температуру  $\sim 50\text{K}$  можна віднести до краю рухомості локалізованих електронів на краю спектру у вузькому інтервалі енергій: від критичних енергій - зародження малих електронних груп до енергії активації, коли електрони де локалізуються. Для Мо – це  $\epsilon_{C1}$  енергія зародження малої електронної лінзи нижче рівня Фермі та  $\epsilon_{C2}$  - енергія вище рівня Фермі, при якій з являється нова електронна група під дією домішок Re. Наведені результати свідчать про те, що рух рівня Фермі відносно критичних енергій електронного спектру під впливом зовнішніх дій приведе до електронно-топологічних переходів, які одночасно мають ознаки переходів метал-діелектрик.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** рухомість електронів, критичні енергії електронного спектру, край рухомості електронно-топологічний перехід, локалізація електронів.

В настоящее время результаты фундаментальных исследований физических характеристик твердых тел интенсивно внедряются в практику. Интерес представляют физические характеристики, изменение которых под действием внешних параметров могут влиять на физические свойства твердых тел. Большинство из них связаны, в определенной мере, с тонкой структурой электронного спектра и электрон-фононным взаимодействием. В работе [1] проведены подробные исследования эффекта Холла Мо и его сплавов с примесями Re и Nb, в результате получены зависимости ряда кинетических характеристик от температуры и концентрации примесей. В то же время, полной ясности о природе особенностей этих характеристик не было.

Результаты работы [2], полученные на аналогичных образцах, показали, что проводимость  $\sigma$  молибдена в узком интервале температур до  $\sim 50\text{K}$  резко уменьшается по экспоненте, при дальнейшем увеличении температуры наблюдается переход к более плавной степенной зависимости, переходящей к насыщению. Эти особенности требуют выяснения их природы, основываясь на результатах [1,2] с учетом тонкой структуры электронного спектра, особенностей, связанных с электронными переходами под действием внешних параметров и изменений динамики движения электронов при таких переходах.

Такие вопросы для твердых тел затронуты и в обзоре [3]. Рассмотрение переходов металл-диэлектрик, связанных с особенностями проводимости различных материалов при различных внешних условиях, привели авторов обзора [3] к выводу, что привычная классификация материалов - металлы, полупроводники, диэлектрики, по типу проводимости, определяемой заполнением электронных зон коллективизированными электронами, часто нарушается. Далее цитируем [3]: *«К середине шестидесятых годов появилось немало примеров, нарушающих описанную классификацию, аномальными оказались вещества, претерпевающие переход металл- диэлектрик, то есть имеющие свойства металлов при одних внешних условиях (температура, давление) и диэлектриков при других. Как правило, переход между этими двумя состояниями сопровождается резким изменением электропроводности и других физических свойств. К переходу металл – диэлектрик (ПМД) относятся также переход металл – полупроводник, полуметалл – полупроводник. Наиболее общепринятым является определение ПМД как перехода с изменением типа проводимости».*

Именно такие представления с учетом изменений топологии поверхности Ферми, а вернее при наличии условий, определяющих изменение положения уровня Ферми относительно критических точек электронного спектра, при которых происходит электронно-топологический переход ЭТП, можно привлечь при рассмотрении результатов данной работы.

В данной работе показаны особенности температурных зависимостей подвижности электронов для Мо и сплавов Мо-Re с использованием экспериментальных данных работы [1]. Эти результаты могут быть дополнением экспериментальных фактов к переходам ПМД в переходных металлах со сложной топологией поверхности Ферми в условиях ЭТП [4].

Молибден – это скомпенсированный металл (число электронов и дырок равны), В электронном спектре имеются две критические точки  $\varepsilon_{C1}$  и  $\varepsilon_{C2}$ , близкие к уровню Ферми  $\varepsilon_F$  ( $\varepsilon_{C2} > \varepsilon_{C1}$ ) [5]. Изменение уровня Ферми под влиянием внешних воздействий относительно этих точек может привести к электронно-топологическим переходам [6,7]. По результатам комплексных исследований электронно-топологических переходов ЭТП Мо под влиянием примеси, давления, температуры [8-13] наблюдали появление новой электронной полости поверхности Ферми при пересечении  $\varepsilon_{C2}$  уровнем Ферми. При этом оказалось, что особенности плотности электронных состояний имеют сложный характер, а именно, на фоне корневой особенности  $\delta\nu \sim \sqrt{\varepsilon_F - \varepsilon_C}$ , присущей для сплошного спектра свободных электронов при ЭТП, наблюдаются «осцилляции» в узком интервале энергий [14]. Такая структура плотности электронных состояний характерна для электронов, «локализованных» на краю зоны при переходах металл-диэлектрик [15] и сохраняется до края подвижности, когда при удалении уровня Ферми от края зоны, а в случае ЭТП от критической точки электронного спектра, локализованные электроны приобретают свойства свободных.

Такие изменения энергетического состояния электронов в окрестности особых точек (Ван-Хова [16]) электронного спектра при ЭТП отражаются на динамике движения электронов, что существенно влияет на физические свойства. Например, при изучении ЭТП в системах Мо-Re к ним можно отнести резкий рост температуры сверхпроводящего перехода [17], увеличение термоэдс [9], изменение прочностных характеристик [18].

Существенно отметить, что параметр  $\delta\nu/\nu(\varepsilon)$  (относительное изменение плотности электронных состояний при ЭТП), определенный в работах [8, 9], в Мо составляет  $\sim 10^{-3}$ , поэтому можно предположить, что столь существенные изменения физических характеристик Мо могут быть связаны и с другими изменениями при ЭТП, а именно с изменениями динамики движения электронов.

Одной из важных характеристик, отражающих изменение динамики движения электронов при ЭТП в окрестности критических точек, является подвижность электронов, которая зависит от эффективной массы, процессов рассеяния, электрон-фононного взаимодействия и определяет кинетические характеристики металлов.

Интересным объектом для таких исследований является Мо, у которого критическая энергия  $\varepsilon_{C1}$  ниже уровня Ферми соответствует малой электронной линзе. Эту критическую точку можно рассматривать как зарождение малой электронной полости поверхности Ферми, но при энергиях меньших уровня Ферми. Тогда свойства этих электронов должны быть аналогичны тем, которые образовали малую полость поверхности Ферми выше уровня Ферми Мо при ЭТП под действием 10at%Re при условии  $\varepsilon_F = \varepsilon_{C2}$ . Другими словами, предполагается, что динамика движения электронов малых групп имеет особенности, связанные с их локализованными состояниями в окрестности особых точек электронного спектра. Такие особенности проявляются в кинетических характеристиках, одной из которых является проводимость  $\sigma$ , связанная с подвижностью электронов  $\mu$  следующим образом:  $\sigma = en_e\mu_e$ , где  $e$  – заряд электрона,  $n_e$  и  $\mu_e$  – концентрация и

подвижность электронов соответственно.

В данной работе, используя экспериментальные результаты по эффекту Холла работы [1] и стандартные выражения для подвижности в двухзонной модели [19], получена температурная зависимость подвижности электронов для Mo и ряда сплавов Mo-Re в широком интервале температур.

Особенности температурной зависимости подвижности электронов в Mo и сплавах Mo-Re при изменении температуры и концентрации примеси Re в Mo в различных температурных интервалах позволяют судить о тонкой структуре электронного спектра этих систем.

Цель данной работы – показать, что при исследованиях кинетических характеристик проявляются особенности температурных зависимостей, которые можно отнести к прохождению уровня Ферми через порог подвижности, которому соответствует определенная температура для данного металла. Для Mo и его сплавов Mo-Re это температура 50K, при которой изменяется энергетическое состояние электронов малых групп, критические энергии которых близки к уровню Ферми, что ранее не отмечалось. Эту температуру можно идентифицировать как край подвижности электронов, локализованных на краю спектра или у дна зоны.

Особенности динамики движения электронов при ЭТП предлагается рассматривать в рамках представлений о переходах металл-диэлектрик. Таким образом, предполагается, что электронно-топологические переходы, связанные с критическими точками электронного спектра, сопровождаются изменением динамики движения электронов, характерными для переходов металл-диэлектрик.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В работе [1] приведены экспериментальные данные по эффекту Холла для Mo высокой степени чистоты и сплавов Mo-Re различных концентраций. Удельное сопротивление и другие параметры образцов приведены в работе [1]. Заметим, что значения удельного сопротивления  $\rho$  и результаты температурной зависимости  $\rho(T)$  для идентичных образцов, исследуемых в работах [10-12] находятся в хорошем согласии с результатами [1].

В данной работе были рассчитаны температурные зависимости подвижности электронов Mo и его сплавов по результатам эффекта Холла работы [1], используя двухзонную модель [19]:

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = N_a |e| (n_e \mu_e + n_h \mu_h), \quad (1)$$

где  $\rho$  - удельное сопротивление,  $\sigma$  - удельная проводимость,  $N_a$  - атомная концентрация,  $n_e, n_h$  - число электронов и дырок на атом  $|e|$  - заряд электрона. Атомная концентрация или другими словами число атомов в единице объема определялось, используя данные параметров решетки ОЦК исследованных сплавов в области твердого раствора [20]. На объем элементарной ячейки ОЦК решетки приходится два атома, тогда число атомов в одном см<sup>3</sup> составляет  $N=2/v$ , где  $v$  - объем элементарной ячейки. В случае чистого молибдена количество электронов и дырок, приходящихся на один атом, равны (см. рис. 9 работы [1], приведенной в данной работе как рис.1).

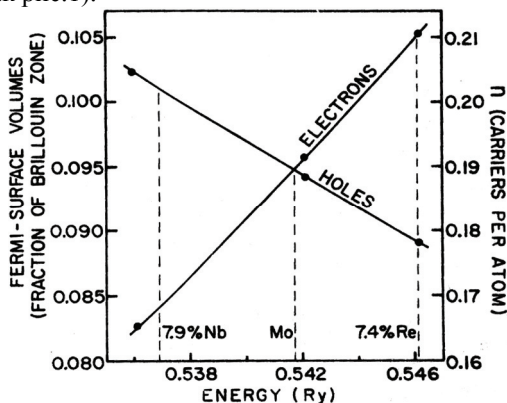


Рис. 1. Зависимость числа электронов и дырок от энергии в соответствии с заполнением дырочных и электронных частей поверхностями Ферми. Пунктирными линиями обозначены уровни Ферми для Mo, Mo-7,3 at%Nb, Mo-7,4 at% Re [1]

Добавление примесей Re смещает уровень Ферми, изменяя количество электронов и дырок  $n_e$  и  $n_h$  на атом, эти значения для различных концентраций определялось по графику рис.9 работы [1] (см. рис.1).

Формула, связывающая постоянную Холла  $R$  и сопротивление в двухзонной модели, имеет следующий вид [1]:

$$\frac{R}{\rho^2} = N_a |e| (n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2). \quad (2)$$

Используя выражения (1) и (2) получаем квадратное уравнение для определения  $\mu_e$ :

$$\mu_e^2 \left( \frac{n_h^2}{n_h} - n_e \right) - \frac{2n_e \mu_e}{\rho N_a |e| n_h} + \frac{1}{(\rho N_a |e|)^2 n_h} - \frac{R}{\rho^2 N_a |e|} = 0. \quad (3)$$

Подставляя значения удельного сопротивления и коэффициента Холла [1] при различных значениях температур определим температурную зависимость  $\mu(T)$ .

Решение уравнения (3) дает два значения для электронной подвижности, одно из которых соответствует правильному физическому смыслу. Выбор знака при решении квадратного уравнения определяется знаком постоянной Холла и соотношением между плотностями электронов и дырок. В данном случае, при положительной постоянной Холла и при большей электронной плотности действительно следует выбирать меньший корень (знак минус), поскольку в противоположном случае дырочная подвижность оказывается отрицательной (хотя должна быть положительной в силу определения).

Некоторые значения подвижности можно сравнить с данными, приведенными в работе [1]. Например, подвижность электронов для Mo-Re 7ат% при  $T=80\text{K}$  имеет значение  $\mu_e = 62\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{сек}^{-1}$ , совпадающее с табличными данными работы [1]. Температурные зависимости подвижности электронов для Mo и сплавов Mo-Re приведены на графике рис. 2.

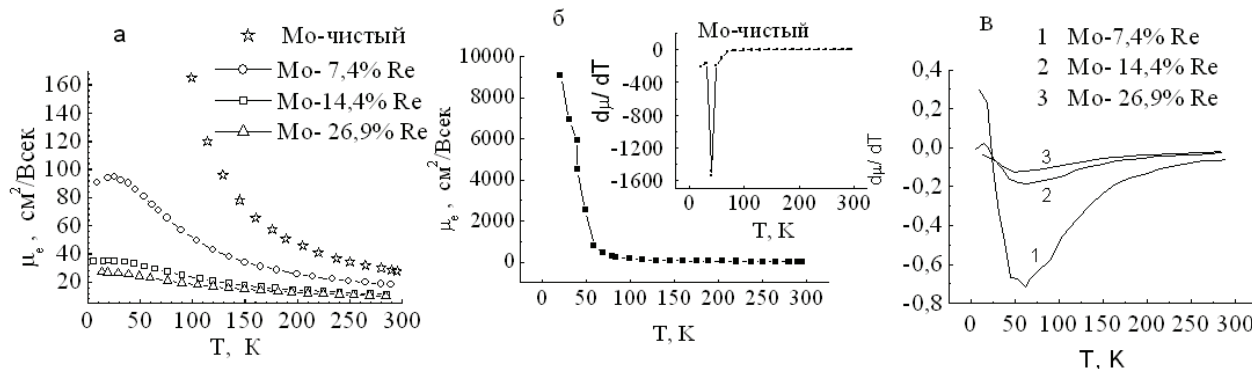


Рис.2. Зависимость подвижности и ее производной по температуре от температуры а) подвижность Mo и сплавов Mo- Re; б) подвижность и производная подвижности по температуре Mo; в) производные подвижности по температуре сплавов Mo- Re.

Из этих результатов видно, что для Mo и сплавов Mo-Re с концентрациями 7ат% Re и 14ат% Re подвижность электронов нелинейно уменьшается с увеличением температуры. Резкое падение подвижности, достигая минимального изменения при 50К, как видно по ходу ее производной по температуре (рис.1б, 1в.), сменяется плавной зависимостью с дальнейшим насыщением при увеличении температуры. Это соответствует минимуму производной  $d\mu/dT$ , затем рост производной с дальнейшим обращением в нуль выше  $\sim 50\text{K}$ , как для Mo, так и для сплавов Mo-Re. Для чистого Mo эти зависимости резкие. Добавление примеси размывает особенности, но характерные точки, а именно минимум производной и выход на насыщение выше  $\sim 50\text{K}$  остаются.

Зависимость подвижности от концентрации для сплавов Mo-Re при различных фиксированных температурах имеет такой же характер, как и температурная зависимость для сплавов с фиксированной концентрацией. Зависимости  $\mu$  (Cat%) приведены на рис. 3. по данным [1] в логарифмическом масштабе.

Из этого графика видно, что повышение температуры приводит к размытию концентрационных зависимостей. Сравнивая результаты, приведенные на рис.2 и рис.3 видно, что примесь рения и температура влияют на подвижность электронов идентичным образом. Аналогичные результаты получены по данным работы [2] при исследовании температурной зависимости проводимости,  $\sigma(T)$  для Mo и его сплавов с примесью Re.

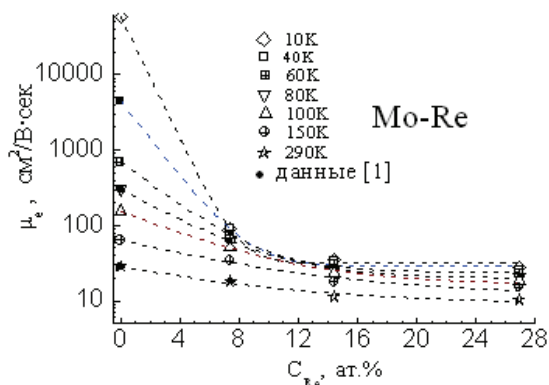


Рис.3. Зависимость подвижности Mo и сплавов Mo- Re от концентрации при различных температурах по данным [1].

получаем параметр затухания  $\Gamma=22\text{K}$ , а  $d\Gamma/dC_{\text{at}\%} \sim 3\text{ K/at}\%$ , тогда для сплава Mo с 10ат% Re параметр  $\Gamma$  составит  $\sim 30\text{K}$ . Это значение совпадает с результатом  $\Gamma=30\text{K}$  для сплава Mo-10ат% Re, определенным в работе [9] по независимым экспериментальным данным термо-ЭДС. Такое соответствие результатов, полученных из разных экспериментов, свидетельствует о корректном определении величины  $\mu_e$ .

Заметим, что экспоненциальная температурная зависимость проводимости Mo до  $\sim 50\text{K}$ , наблюдаемая в

Из полученных данных можно оценить значение параметра затухания, исходя из результатов измерения температурной зависимости постоянной Холла и удельного сопротивления [1]. Как пример приведем оценку для сплава Mo-7,4ат.%Re при низких температурах, когда время релаксации определяется рассеянием на примесях. Времена релаксации

определим, исходя из выражения  $\tau = \frac{m_e \mu}{e}$ , где  $m_e$  - масса свободного электрона,  $e$  - заряд электрона,  $\mu$  - подвижность носителей. Тогда параметр затухания  $\Gamma$  определяется выражением  $\Gamma = \frac{\hbar}{2\pi k \tau} = \frac{\hbar e}{2\pi k \mu m_e}$  [19], где

$k$  - постоянная Больцмана. Используя значение подвижности электронов  $\mu_e$  для сплава Mo-7,4ат.% Re





