



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский
Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-
исследовательский институт технической физики имени академика Е. И.
Забабихина»

Электронная структура, динамика кристаллической решётки и коэффициент электрон-фононного обмена металлов при их неравновесном нагреве

Н. А. Смирнов

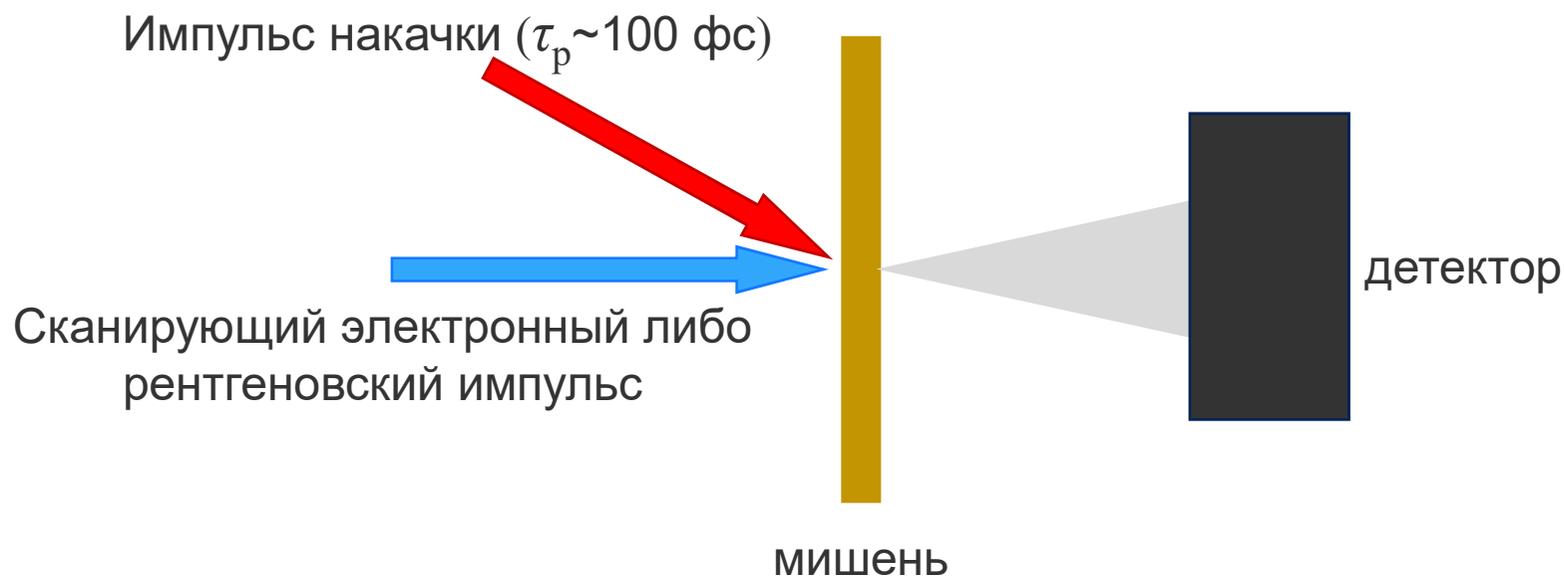
XVII Международная конференция «ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ» 2025

Мотивация:

Воздействие фемтосекундного лазерного излучения на вещество



Неравновесный нагрев вещества: $T_e \gg T_i$



Двухтемпературная модель [1]:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla[\kappa_e(T_e, T_i) \nabla T_e] - (T_e - T_i) \cdot G(T_e) + S(z, t)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = (T_e - T_i) \cdot G(T_e)$$

Кoeffициент электрон-фононного обмена

Метод расчёта:

Для первопринципных расчётов свойств металлов используется один из вариантов полнопотенциального полноэлектронного метода линейных маффин-тин орбиталей (FP-LMTO) [2].

Коэффициент электрон-фононного обмена [3]:

$$G(T_e) = \frac{2\pi\hbar}{(T_i - T_e)} \int_0^\infty \omega d\omega \int_{-\infty}^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \alpha^2 F(\varepsilon, \omega) S(\varepsilon, \varepsilon + \hbar\omega)$$

Здесь:

$$S(\varepsilon, \varepsilon + \hbar\omega) = [f_e(\varepsilon) - f_e(\varepsilon + \hbar\omega)] [n(\hbar\omega, T_i) - n(\hbar\omega, T_e)]$$

$$\alpha^2 F(\varepsilon, \omega) = \frac{2}{N(\varepsilon)} \sum_{q,\nu} \delta(\omega - \omega_{\bar{q},\nu}) \sum_{k,i,j} |W_{k+q,j;k,i}^{q,\nu}|^2 \delta(\varepsilon_{k,i} - \varepsilon) \delta(\varepsilon_{k+q,j} - \varepsilon)$$

← спектральная функция
распределения
электрон-фононного
взаимодействия

$$W_{\bar{k}+\bar{q},j;\bar{k},i}^{\bar{q},\nu} = \langle \psi^{\bar{k}+\bar{q},j} | \delta^{\bar{q},\nu} v_{\text{eff}} | \psi^{\bar{k},i} \rangle$$

← электрон-фононный матричный элемент определяющий
вероятность рассеяния электрона из начального состояния
{k,i} в конечное - {k+q,j} фононом {q,ν} с частотой ω_{q,ν}.

[2] Savrasov S. Y. // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54, № 23. – P. 16470.

[3] Smirnov N. A. // Phys. Rev. B. – 2020. – V. 101, № 9. – P. 094103.

Результаты расчётов:

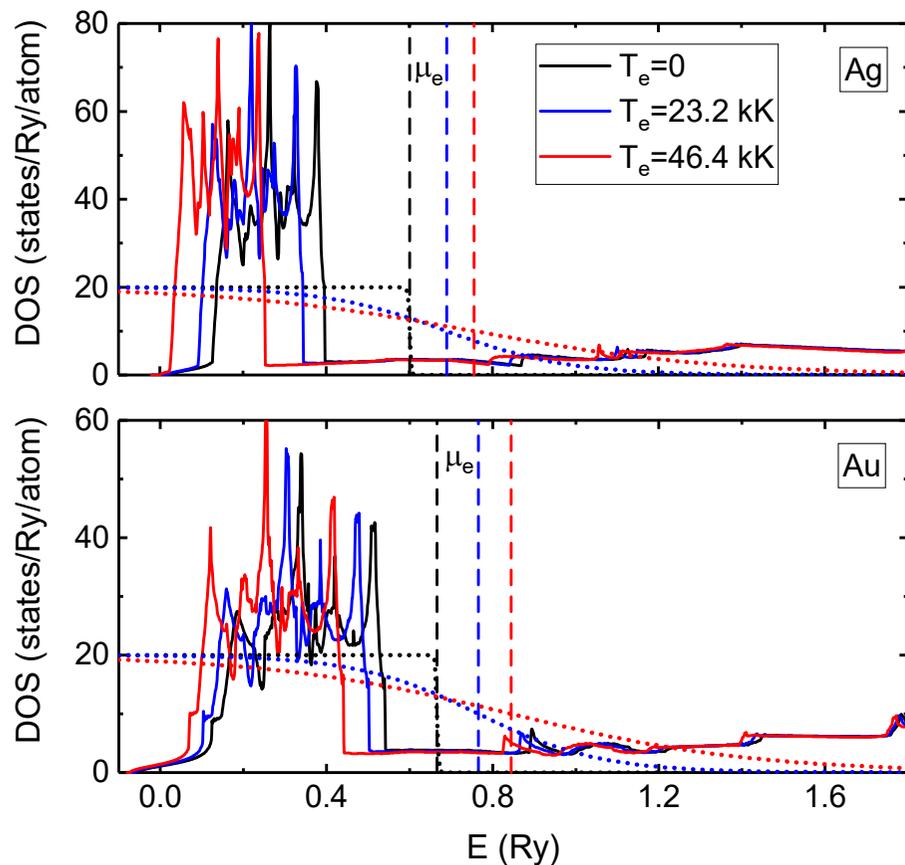


Рис. 1. Плотность состояний электронов гцк кристаллов Ag и Au для нескольких T_e . Штриховые линии – положения химических потенциалов μ_e . Точечные линии – функции Ферми-Дирака.

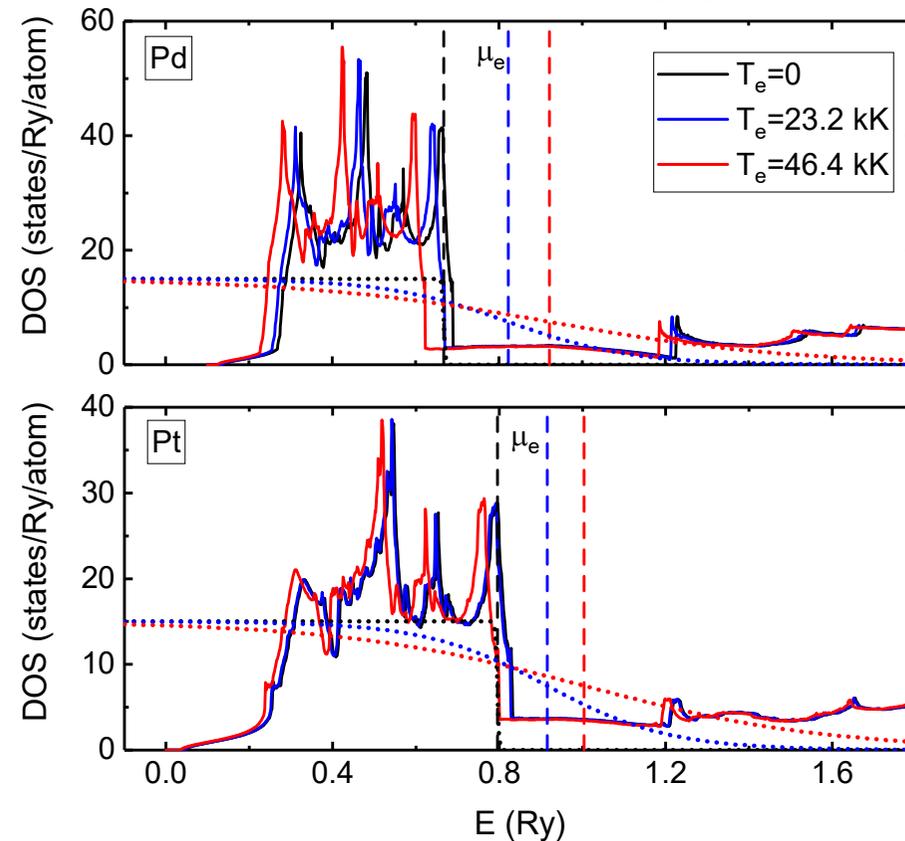


Рис. 2. Плотность состояний электронов гцк кристаллов Pd и Pt для нескольких T_e .

Результаты расчётов:

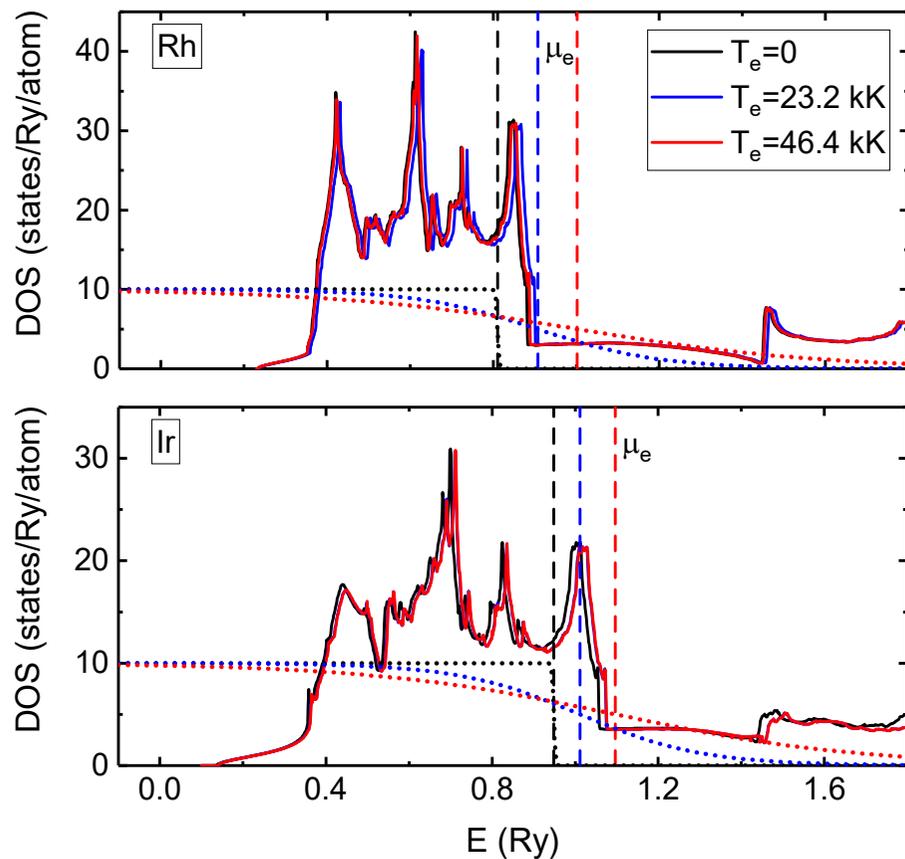


Рис. 3. Плотность состояний электронов гцк кристаллов Rh и Ir для нескольких T_e .

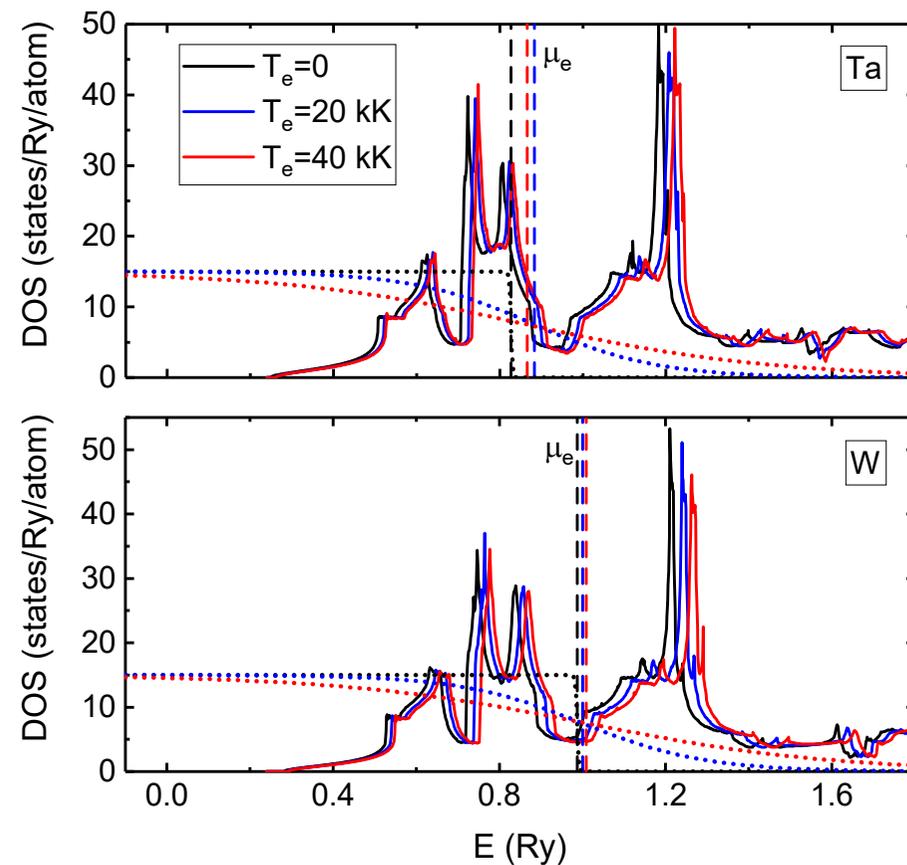


Рис. 4. Плотность состояний электронов оцк кристаллов Ta и W для нескольких T_e .

Результаты расчётов:

$$N_l(T_e) = \int_0^{\infty} g_l(\varepsilon, T_e) f_e(\varepsilon, \mu_e, T_e) d\varepsilon$$

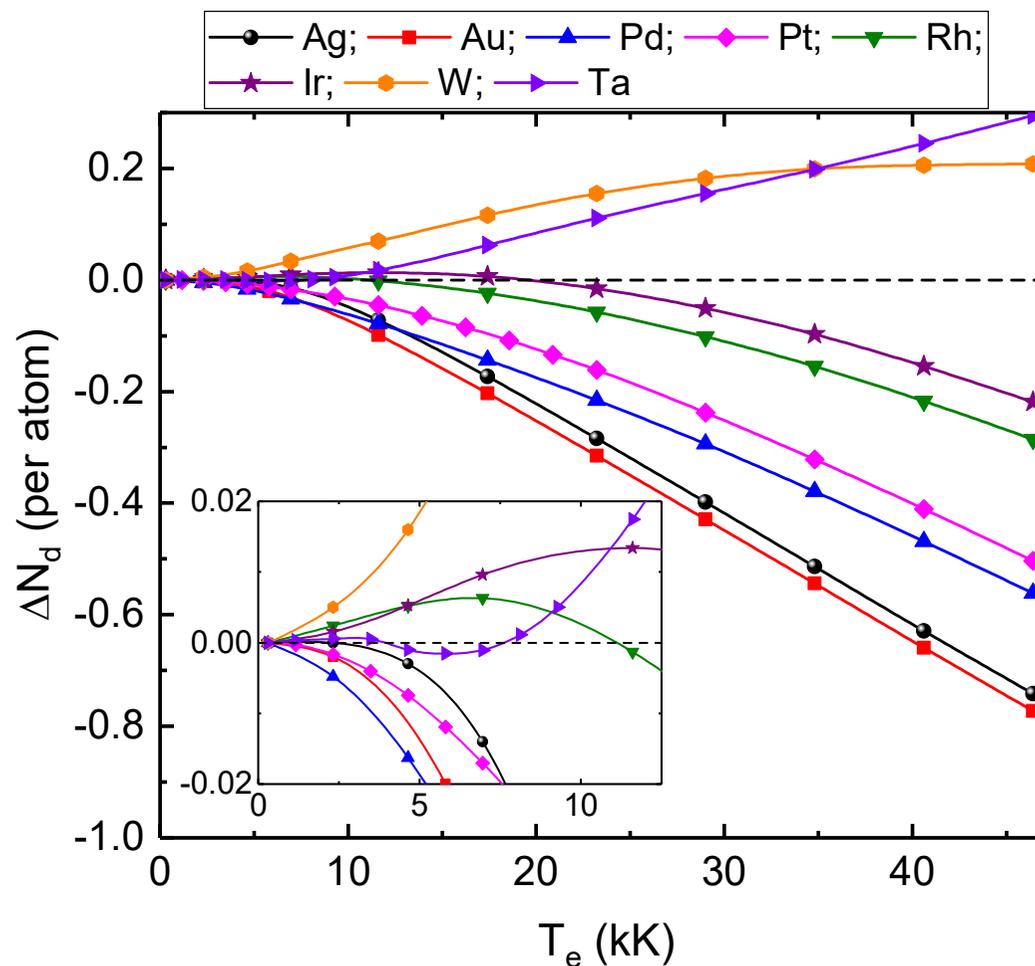


Рис. 5. Относительное изменение числа d -электронов от температуры для рассмотренных металлов. На вставке подробно показана область низких температур.

Результаты расчётов:

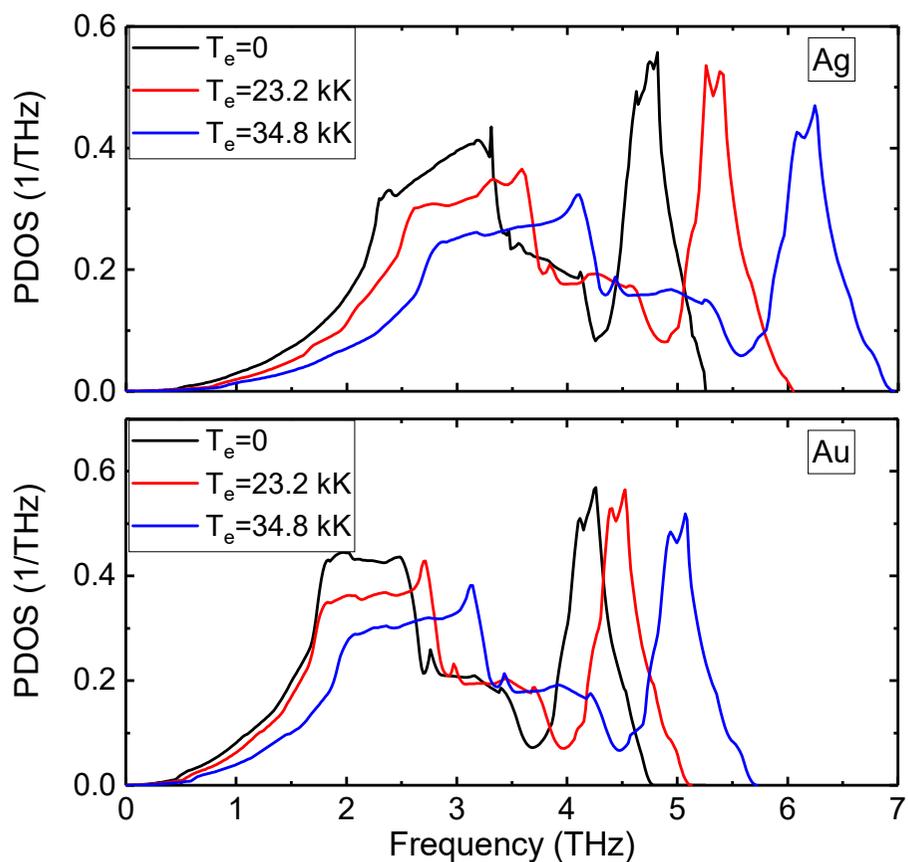


Рис. 6. Плотность состояний фононов Ag и Au при различных значениях электронных температур.

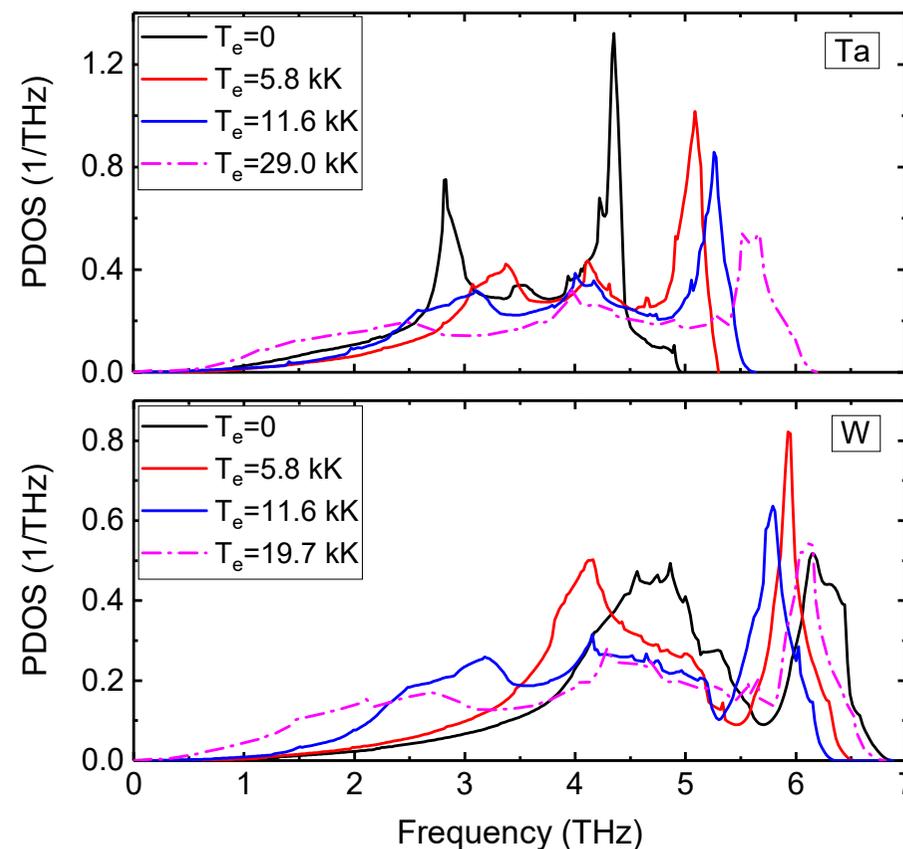


Рис. 7. Плотность состояний фононов Ta и W при различных значениях электронных температур.

Результаты расчётов:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar V}{2M} \int_0^\infty d\omega \frac{F(\omega(T_e))}{\omega(T_e)} \coth\left(\frac{\hbar\omega(T_e)}{2k_B T_i}\right) \longrightarrow \langle u^2 \rangle = \frac{9\hbar^2}{M k_B \Theta(T_e)} \left[\frac{1}{4} + \left(\frac{T_i}{\Theta(T_e)}\right)^2 \int_0^{\Theta/T_i} \frac{x}{\exp(x)-1} dx \right]$$

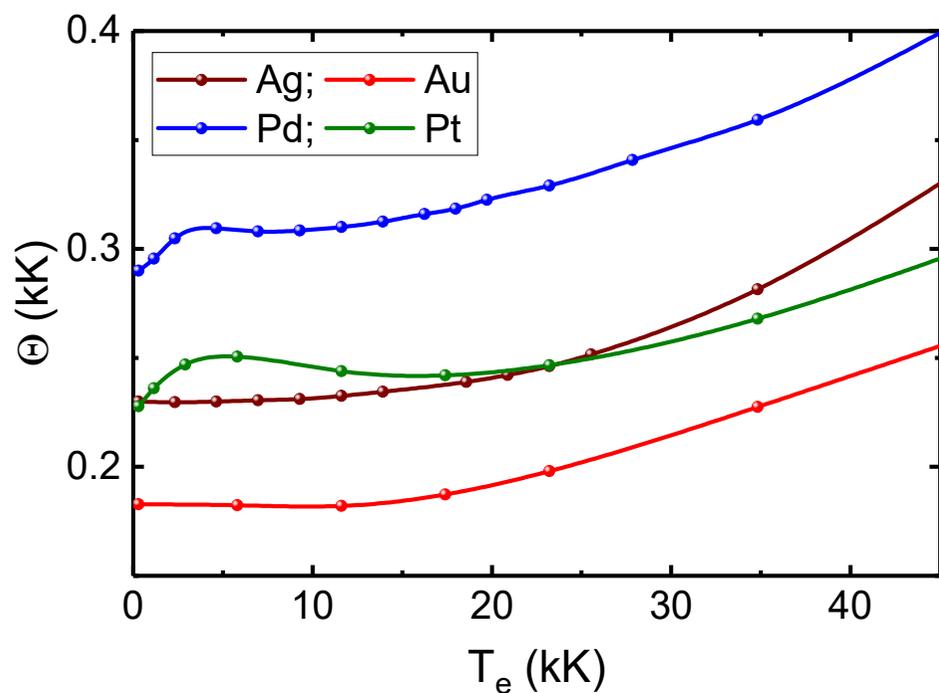


Рис. 8. Зависимость характеристической температуры от T_e для Ag, Au, Pd и Pt.

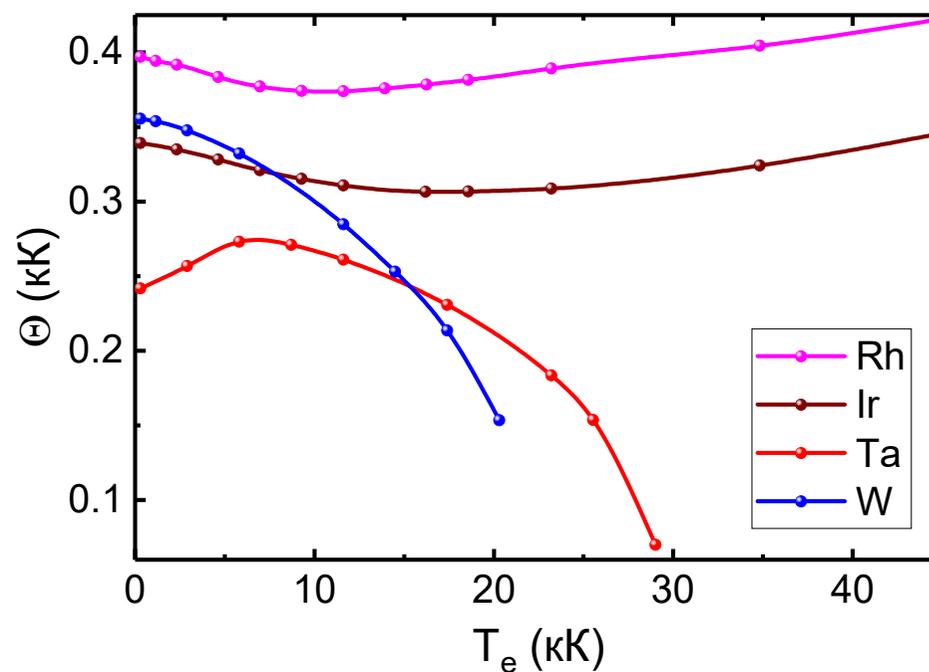


Рис. 9. Зависимость характеристической температуры от T_e для Rh, Ir, Ta и W.

Результаты расчётов:

$$G(T_e) \approx 2\pi\hbar k_B N_F \int_0^\infty \omega \alpha^2 g(\omega) d\omega \int_{-\infty}^\infty \frac{N^2(\varepsilon)}{N_F^2} \left(-\frac{\partial f_e}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \longleftarrow \alpha^2 g(\varepsilon, \omega) \approx \left[\frac{N(\varepsilon)}{N(E_F)} \right]^2 \alpha^2 g(\omega, \varepsilon = E_F)$$

Wang X. Y., Riffe D. M., Lee Y.-S., Dower M. C. // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50, № 11. – P. 8016-8019.

Lin Z., Zhigilei L. V., Celli V. // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 77, № 7. – P. 075133.

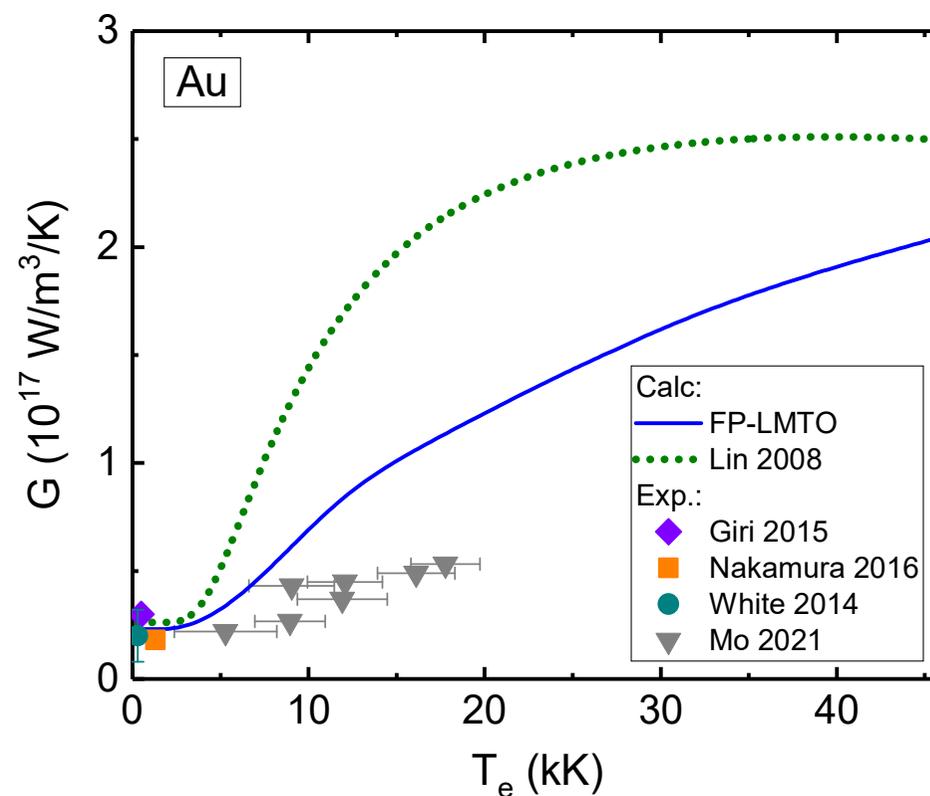
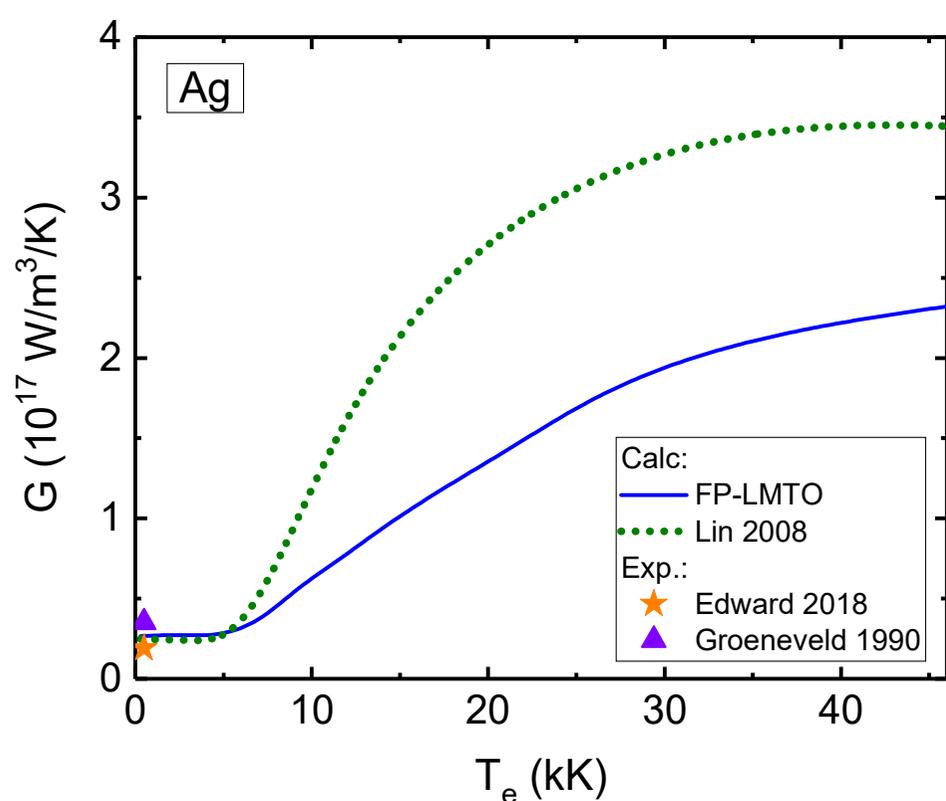


Рис. 10 и 11. Изменение коэффициента электрон-фононного обмена Ag и Au в зависимости от электронной температуры.

Результаты расчётов:

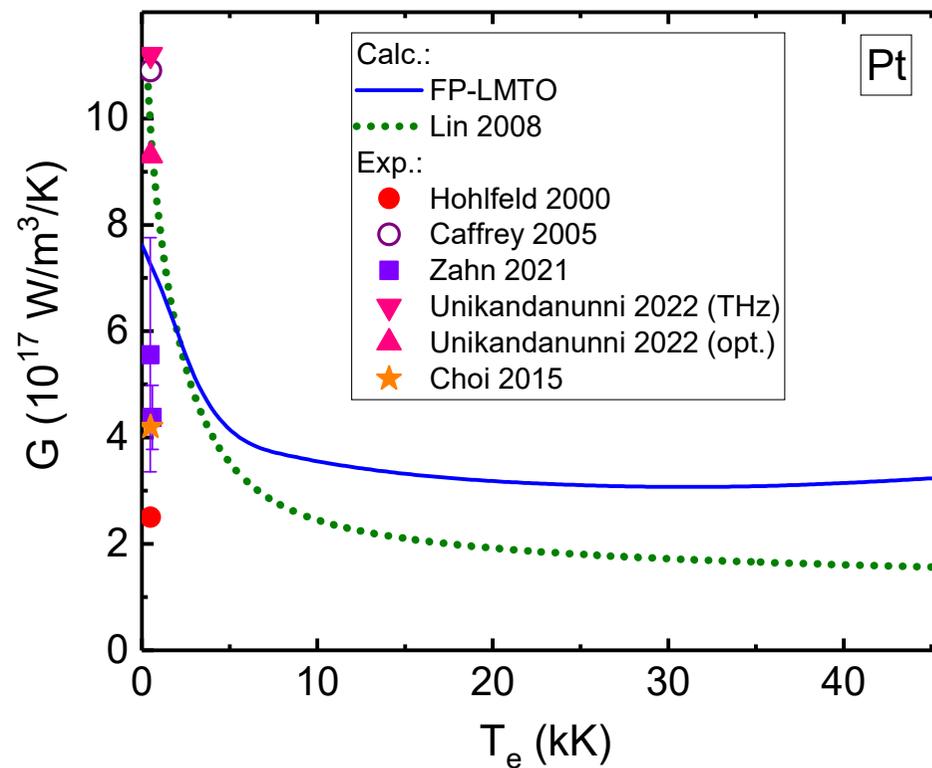
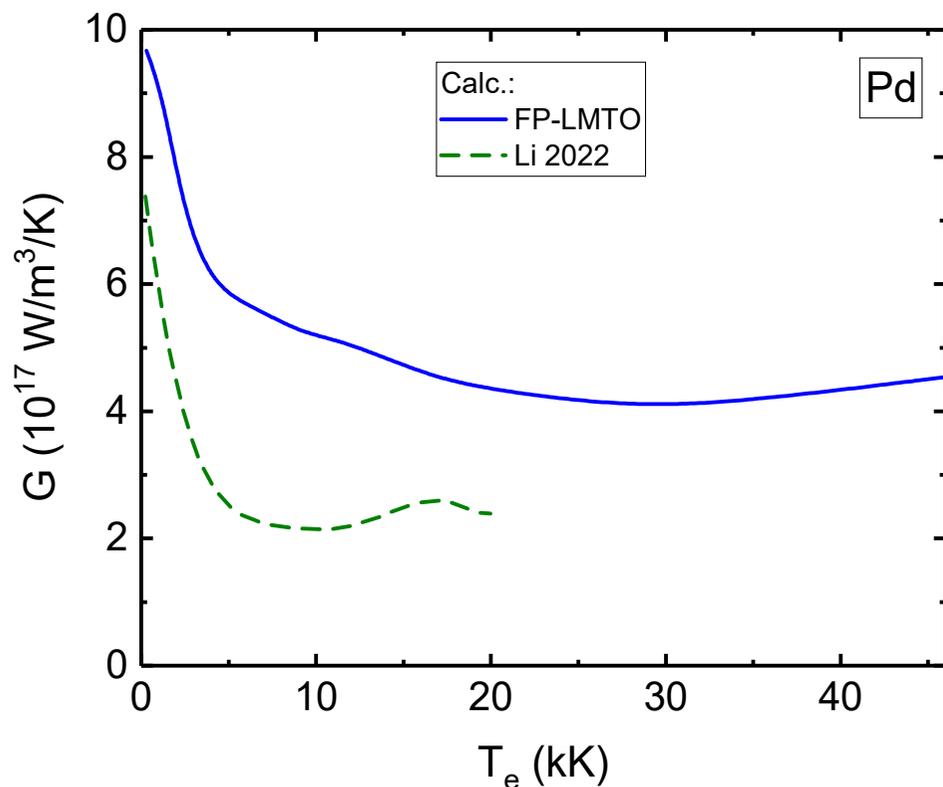


Рис. 12 и 13. Изменение коэффициента электрон-фононного обмена Pd и Pt в зависимости от электронной температуры.

Результаты расчётов:

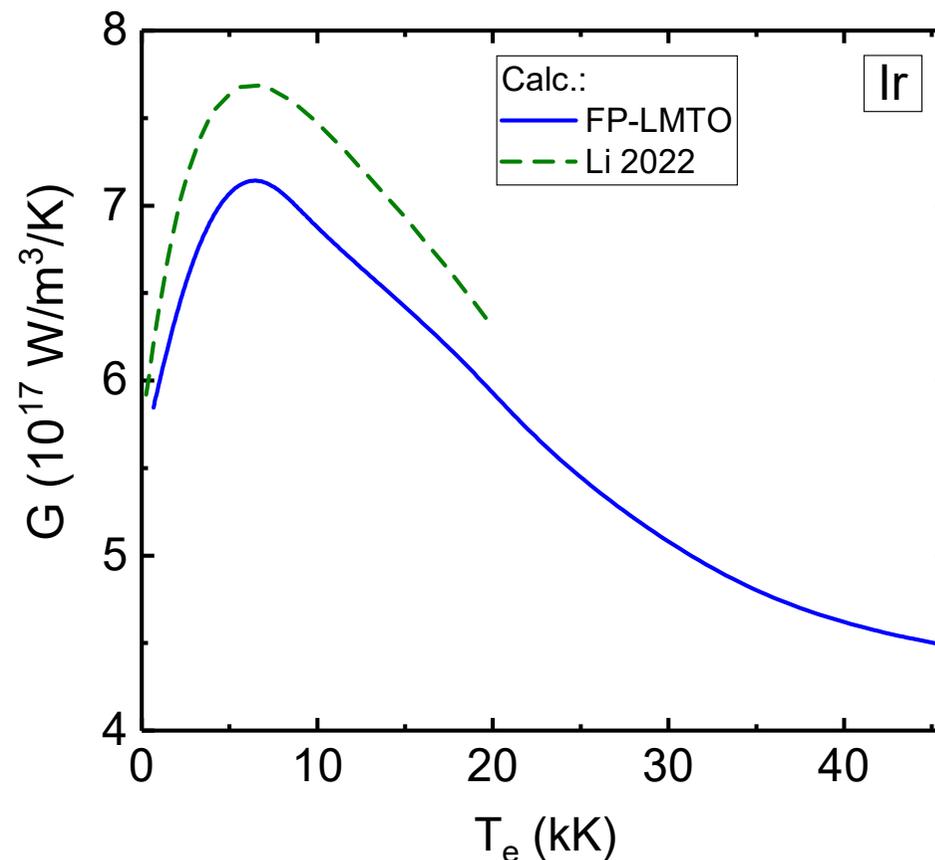
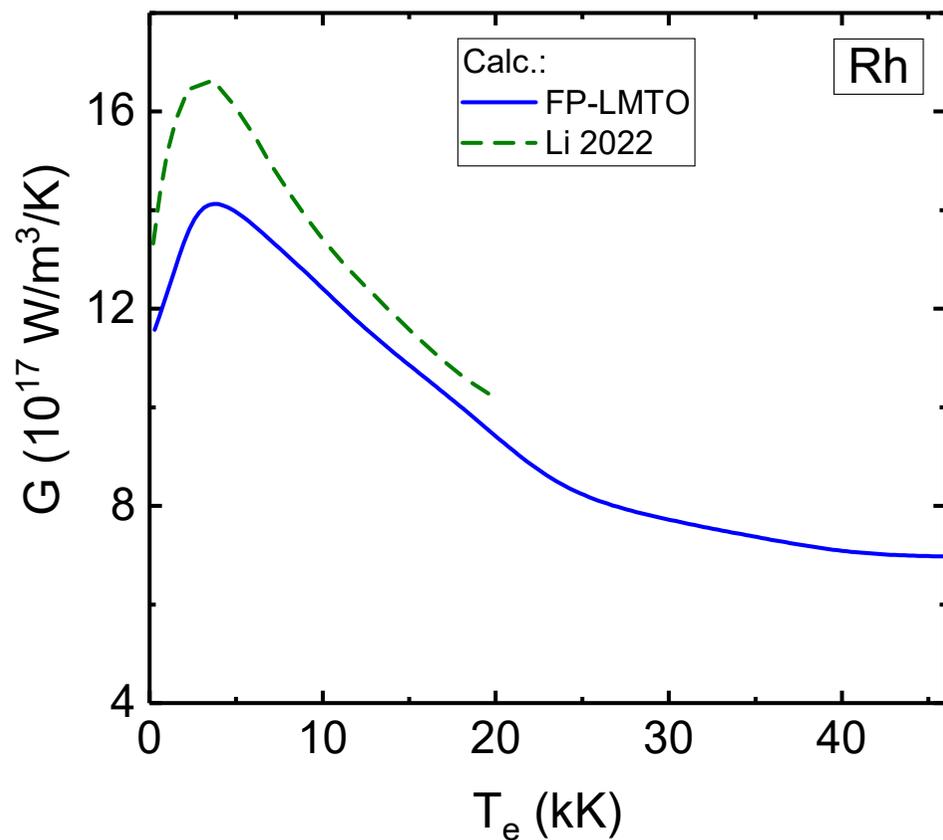


Рис. 14 и 15. Изменение коэффициента электрон-фононного обмена R_h и I_r в зависимости от электронной температуры.

Результаты расчётов:

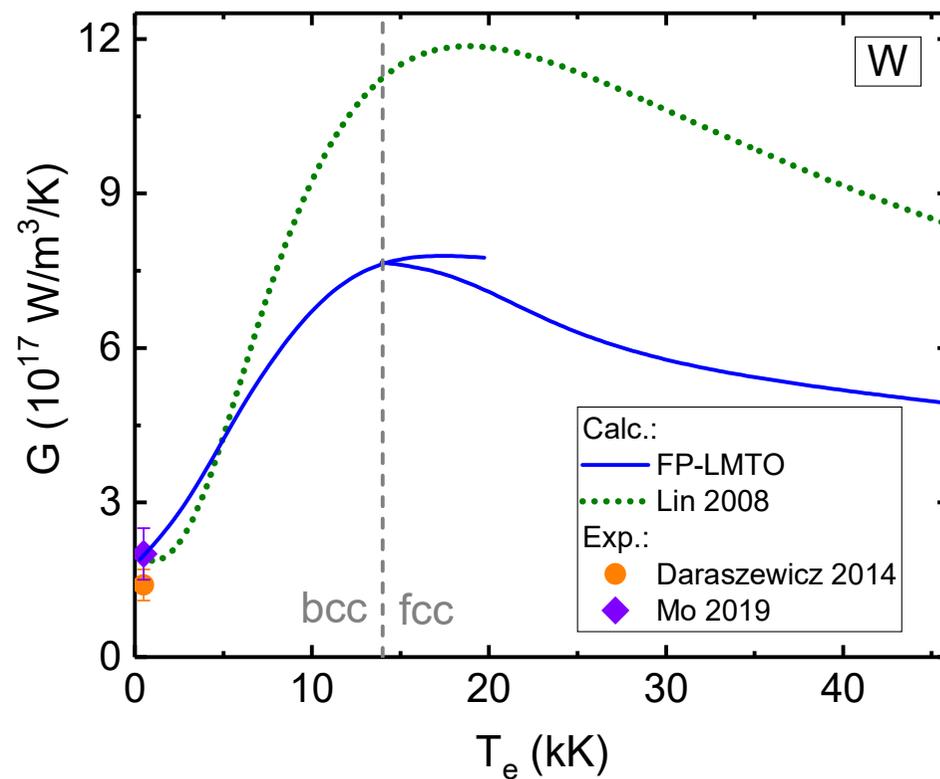
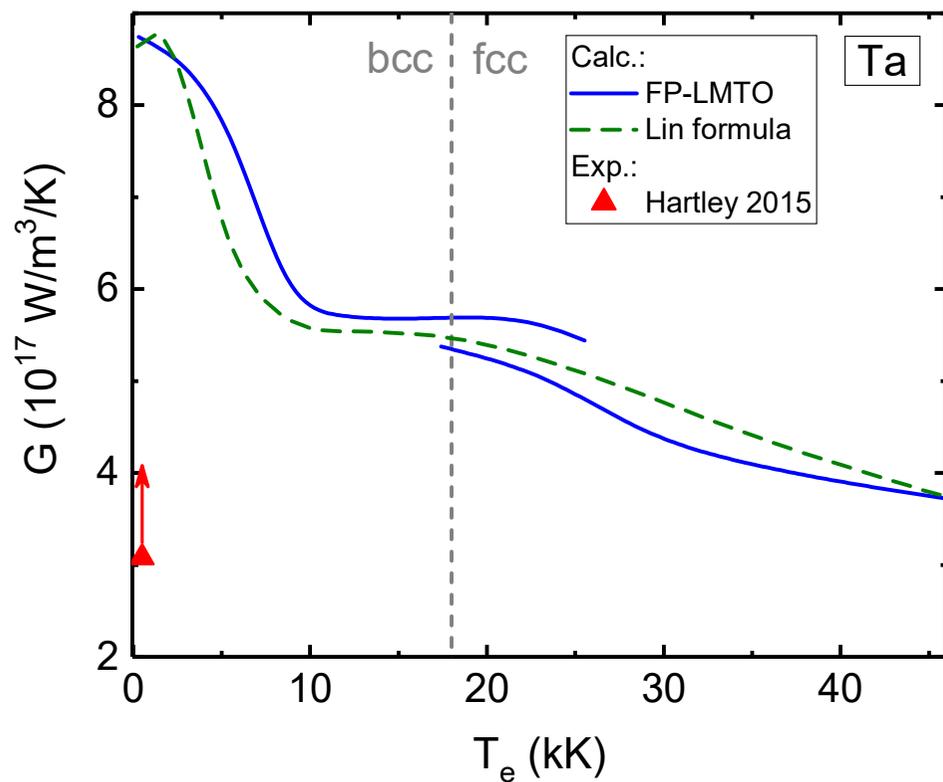


Рис. 16 и 17. Изменение коэффициента электрон-фононного обмена Ta и W в зависимости от электронной температуры.

Заключение



- Выполненные расчёты показали, что на начальном этапе нагрева ($T_e < 20$ кК) рост температуры электронов в рассмотренных гцк металлах может приводить к различным изменениям динамики кристаллической решётки. Так, кристаллы Pd, Pt могут упрочняться, Rh, Ir - смягчаться, а для Ag, Au динамика решётки практически не изменяться. Однако смягчение решётки никогда не приводит к потере динамической стабильности рассмотренных гцк кристаллов. При более высоких температурах ($T_e > 25$ кК) у данных металлов всегда преобладает тенденция к упрочнению кристаллической решётки.
- В свою очередь, в оцк металлах Ta и W изменение взаимодействия в системе с ростом температуры электронов выше 20 кК приводит к потере динамической устойчивости. Кроме этого, повышение T_e в этих металлах ведёт к термодинамической стабилизации гцк фазы вместо оцк.
- Эволюция динамики кристаллической решётки достаточно хорошо коррелирует с изменением степени заполнения внешних d -оболочек рассмотренных металлов при увеличении T_e . Уменьшение числа d -электронов приводит к упрочнению кристалла из-за падения экранировки кулоновского потенциала ядер, а рост количества этих электронов приводит к усилению электронной экранировки и смягчению кристаллической решётки. Таким образом, о эволюции динамики решётки в целом можно достаточно надёжно судить, основываясь на вариации степени заполнения d -зон при нагреве электронной подсистемы.
- Отличия в электронной структуре металлов сильно влияют на характер зависимости коэффициента электрон-фононного обмена от температуры электронов. Повышение T_e может приводить как к значительному росту коэффициента G , так и к его уменьшению. Элементы, находящиеся в одной группе периодической таблицы, имеют схожий характер изменения функции $G(T_e)$. Однако переход к другой группе может радикально изменить функциональную зависимость этого коэффициента от T_e .

Спасибо за внимание!