

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, ДИНАМИКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ И КОЭФФИЦИЕНТ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ОБМЕНА МЕТАЛЛОВ ПРИ ИХ НЕРАВНОВЕСНОМ НАГРЕВЕ

Н. А. Смирнов

ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

В работе выполнены расчеты из первых принципов электронной структуры, фононных спектров и коэффициентов электрон-фононного обмена $G(T_e)$ ряда металлов (Ag, Au, Pd, Pt, Rh, Ir, W и Ta) при различных значениях температуры электронной подсистемы T_e и «холодной» кристаллической решетки. Мы изучили вопрос о влиянии изменений электронной структуры металлов при нагреве электронной подсистемы на динамику кристаллической решетки и коэффициент электрон-фононного обмена. Проведенные исследования показывают, что эволюция динамики кристаллической решетки 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 решетки. Как показали расчеты, на начальном этапе нагрева ($T_e < 20$ кК) рост температуры электронов в гцк металлах может приводить, как к упрочнению кристаллической решетки (Pd, Pt), так к ее смягчению (Rh, Ir), либо вызывать достаточно слабые изменения в динамике решетки (Ag, Au). Однако смягчение решетки никогда не приводит к потере динамической стабильности гцк металлов. При более высоких температурах ($T_e > 20$ кК) у данных металлов всегда преобладает тенденция к упрочнению кристаллической решетки. В свою очередь, изменение взаимодействия с ростом температуры электронов выше 20 кК приводит к потере динамической устойчивости металлов с оцк структурой. Исследования показывают, что указанные тенденции изменения динамики решетки имеют глобальный характер среди металлов. В работе также показано, что отличия в электронной структуре металлов сильно влияют на характер зависимости коэффициента электрон-фононного обмена от температуры электронов.
