УДК 546.271:539.18

РОЗРАХУНОК ДЕЯКИХ ПАРАМЕТРІВ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ВИЩИХ БОРИДІВ РІДКОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

Моісеєнко Л.Л.,
Херсонський державний морський інститут

У роботі проведено оцінку деяких параметрів електронної структури додекаборидів рідкоземельних металів (РЗМ) в однозонному наближенні на підставі експериментальних результатів їх електрофізичних властивостей.
Порівняння запропонованого аналітичного розрахунку з відомим графічним показало достатню близькість результатів, що підтверджує доцільність використовування даного розрахунку внаслідок його простоти і меншої трудомісткості.
Ключові слова: електронна структура, додекабориди РЗМ, енергія Фермі, коефіцієнт розсіювання.

Вступ, постановка задачі. У роботі проведена оцінка деяких параметрів електронної структури додекаборидів рідкоземельних металів (РЗМ) в однозонному наближенні на підставі експериментальних результатів їх електрофізичних властивостей.

Зразки для дослідження електрофізичних властивостей зазначених матеріалів одержані шляхом двохступінчастого синтезу при вакуумному боротермічному відновленні [1]. За результатами хімічного, рентгенівського та спектрального аналізів одержані матеріали були однофазними, що відповідали формулі сполук типу MeB_{12}. Для проведення експериментальних досліджень зразки готувалися методом вакуумного спікання з попереднім пресуванням на холоді під тиском близько 10^4 *кГ/см*^{2}.

Як відомо, електронна структура металоподібних сполук перехідних металів складна і визначається, в основному, електронно-дірковим характером явищ електропереносу внаслідок незаповнених електронних оболонок і перекриття верхніх енергетичних зон. Тому застосування однозонного уявлення до боридів металів не завжди виправдане. Але, разом з тим, експериментальні дослідження електричного опору ρ, коефіцієнта термо-*ерс* α, ефекту Холла R додекаборидів РЗМ при температурі $T = 300$ *K* [2] вказують на домінуючий електронний характер провідності σ, що дає підстави використати однозонні уявлення для оцінки параметрів електронної структури таких, як енергія Фермі μ, ефективна маса носіїв струму m^* та коефіцієнт розсіювання носіїв r.

Для розрахунку величин μ і r була розв'язана система рівнянь [3], що пов'язує зазначені параметри із експериментально визначеними величинами електричного опору, коефіцієнта термо-*ерс* і їх температурними похідними $\frac{d\rho}{dT}$ та $\frac{d\alpha}{dT}$:

$$\frac{T}{\rho}\frac{d\rho}{dT} = f_1(\mu^*, r); \qquad T\frac{d\alpha}{dT} = f_2(\mu^*, r), \tag{1}$$

де $\mu^* = \frac{\mu}{kT}$, k – постійна Больцмана.

В однозонному наближенні у випадку сильного, але неповного виродження, коефіцієнт термо-*epc* α і електричний опір ρ зв'язані з енергією Фермі і параметром розсіювання наступними виразами:

$$\alpha = \frac{\pi^2 k^2}{3e}\frac{T}{\mu}(r+1); \tag{2}$$

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{enn}, \tag{3}$$

де рухливість електронів $u = u_0 T^{-3/2(1-r)}$, (4)

а їх концентрація $n = \frac{8\pi}{h^3}(2m^*)^{3/2}\mu^{3/2}[1 + \frac{\pi^2(kT)^2}{8\mu^2}]$. (5)

Підстановка формул (2)…(5) у вираз (1) приводить до системи рівнянь із формул (6 та 7):

$$f_1(\mu^*, r) = \frac{3}{2}(1-r) - \frac{1}{\frac{4\mu^{*2}}{\pi^2} + \frac{1}{2}}; \tag{6}$$

$$f_2(\mu^*, r) = \frac{\pi^2 k(r+1)}{3e\mu^*}. \tag{7}$$

Ця система рівнянь може бути розв'язана графічно. Для цього, надаючи різні значення коефіцієнту розсіювання

$$r = \frac{2}{3}\frac{T}{\rho}\frac{d\rho}{dT}, \tag{8}$$

знаходилися відповідні значення енергії Фермі

$$\mu^* = \frac{\pi^2 k(r+1)}{3eT\frac{d\alpha}{dT}} \tag{9}$$

для різних температур в інтервалі T=125…300 K і будувалися сімейства характеристик $f_1(\mu)$ та $f_2(\mu)$ при різних значеннях r у межах 0…2. Для

значень μ^*>10 знаходився інтеграл Фермі – Дірака $F_{1/2}(\mu^*)$, за допомогою якого число носіїв струму пов'язане з рівнем Фермі співвідношенням

$$n = 4{,}831 \cdot 10^{15} (\frac{m^*}{m_0})^{3/2} T^{3/2} F_{1/2}(\mu^*), \quad (10)$$

який розраховувався за формулою

$$F_{1/2}(\mu^*) = \frac{4\mu^{*3/2}(1 + \frac{\pi^2}{8\mu^{*2}})}{3\pi^{1/2}}. \quad (11)$$

Побудовані графіки $\mu(r)$ для функцій f_1 та f_2, перетинаючись дають оптимальні значення рівня Фермі μ і коефіцієнта розсіювання *r*.

Та графічний спосіб досить трудомісткий і надто наближений. Доцільним є аналітичне рішення системи відносно μ і r , що приводить до кубічного рівняння, яке розв'язується методом Кардано. Зокрема, відносно параметра розсіювання *r* кубічне рівняння має вигляд:

$$r^3 + \frac{2f_1 - 3}{3} r^2 + (\frac{4f_1 - 3}{3} - \frac{13{,}5e^2 f_2^2}{12\pi^2 k^2}) r + (\frac{2f_1 - 3}{3} + \frac{e^2 f_2^2 (9f_1 - 31{,}5)}{12\pi^2 k^2}) = 0. \quad (12)$$

Аналогічно записується і кубічне рівняння відносно енергії Фермі μ.

Результати дослідження. Експериментальні результати електрофізичних властивостей зразків та розраховані зазначеним чином параметри електронної структури енергії Фермі μ^* і коефіцієнта розсіювання *r* наведені у таблицях 1 та 2.

Таблиця 1 – Експериментальні електрофізичні властивості додекаборидів РЗМ

Фаза	ρ, 10^{-8} Ом·м	α, 10^{-6} В·К$^{-1}$	*R*, 10^{10} м^3/Кл
YB_{12}	11,56	-3,2	-4,88
TbB_{12}	16,60	-2,8	-4,85
DyB_{12}	13,32	-2,9	-4,84
HoB_{12}	13,85	-3,3	-4,85
ErB_{12}	14,18	-1,6	-4,86
TmB_{12}	15,95	-1,9	-4,90
YbB_{12}	188,4	-39,3	-7,30
LuB_{12}	12,20	-2,8	-4,98

Таблиця 2 – Розрахункові результати параметрів електронної структури додекаборидів РЗМ

Фаза	$\frac{d\rho}{dT}$, 10^{-10}	$\frac{d\alpha}{dT}$, 10^{-8}	$\frac{m^*}{m_0}$	Розраховані параметри			
				аналітично		графічно	
				μ, eB	r	μ, eB	r
YB_{12}	6,0	-1,7	1,443	1,38	-0,039	1,38	-0,039
TbB_{12}	6,75	-4,25	0,294	6,82	0,187	7,014	0,186
DyB_{12}	4,87	-1,5	0,969	2,06	0,268	2,068	0,269
HoB_{12}	5,25	-1,3	0,857	2,33	0,242	2,34	0,241
ErB_{12}	5,59	-1,28	0,864	2,314	0,21	2,31	0,212
TmB_{12}	6,06	-3,75	0,246	8,078	0,24	8,066	0,241
YbB_{12}	-17,07	17,5	5,005	8,30	1,169	0,312	1,35
LuB_{12}	6,82	-1,52	1,292	1,55	-0,034	1,54	-0,041

Висновки. Порівнюючи результати аналітичного і графічного способів визначення параметрів електронної структури додекаборидів РЗМ, слід відмітити достатню близькість їх між собою, хоча і є деякі незначні відмінності параметрів, можливо за рахунок похибок експериментальних даних.

Відносна простота аналітичного розрахунку свідчить про більшу доцільність його застосування при визначенні параметрів електронної структури металоподібних сполук в однозонному наближенні при звичайних кімнатних температурах.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Моисеенко Л.Л., Одинцов В.В. Особенности получения однофазных кубических додекаборидов редкоземельных металлов // Изв. Сибирского отделения АН СССР, Серия химических наук. – 1978. – Вып. 5, №12. – С. 48-50.

2. Моисеенко Л.Л. Электрофизические свойства додекаборидных фаз РЗМ // Укр. физ. журнал. – 1982. – Вып. 27, №9. – С. 1340-1343.

3. Самсонов Г.В., Серебрякова Т.И., Неронов В.А. Бориды. – М.: Атомиздат, 1975. – 376 с.

4. Падерно Ю.Б., Серебрякова Т.И., Дудник Е.М., Лазоренко В.И. Некоторые электрофизические характеристики тетраборидов РЗМ. – В кн.: Сплавы редких металлов с особыми физическими свойствами. – М.: Наука, 1975. – С. 118-121.

Моисеенко Л.Л. РАСЧЕТ НЕКОТОРЫХ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ВЫСШИХ БОРИДОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

В работе проведена оценка некоторых параметров электронной структуры додекаборидов редкоземельных металлов (РЗМ) в однозонном приближении на основании экспериментальных результатов их электро-физических свойств.

Сравнение предложенного аналитического расчета с известным графическим показало достаточную близость результатов, что подтверждает целесообразность использования данного расчета вследствие его простоты и меньшей трудоемкости.

Ключевые слова: электронная структура, додекабориды РЗМ, энергия Ферми, коэффициент рассеивания.

Moiseenko L.L. CALCULATION OF SOME PARAMETERS OF ELECTRONIC STRUCTURE FOR HIGHER BORIDES OF RARE-EARTH METALS

The estimation of some parameters of electronic structure of dodeca-borides of rare-earth metals (RZM) is in-process conducted in the single zone approximation on the basis of experimental results of their electro-physical properties. The comparison of the proposed analytical calculation with the known graphical one has shown a sufficient proximity of results that confirmed the expedience of the use of this calculation because of its simplicity and less labor intensiveness.

Key words: electronic structure, dodeca-borides of RZM, Fermi's energy, dissipation factor.