

擬ポテンシャル法による金属電気抵抗の温度依存性と音速の解析*

孫 新*¹, 小竹茂夫*²
鈴木泰之*², 妹尾允史*²Evaluation of Sound Velocity and Temperature Dependence
of Electrical Resistivity using Pseudopotential MethodXin SUN, Shigeo KOTAKE,
Yasuyuki SUZUKI and Masafumi SENOO

There are two main methods to calculate the temperature dependence of electrical resistivity. The first one known as the Ziman method is based on relaxation time calculations. The second, known as the correlation function method, is one of many methods used to arrange Kubo expressions into a new formula is very simple to use to calculate transport properties. In this work, we applied these two methods to electron-ion interactions of simple metals which can be described by a local pseudopotential. There the temperature dependence of the electrical resistivity of the simple metals was calculated. The results were compared with experimental data over a wide range of temperatures and agreement was found to be good for both methods. Compared with Ziman method, correlation function method is more appropriate for calculating the electrical resistivity of high Debye temperature metals. Also, the relationship between the electrical and mechanical properties of metals is discussed. Particularly, we outline a method to evaluate the temperature dependence of sound velocity and elastic constant by calculating electrical resistivity.

Key Words: Relaxation Time, Linear Response Theory, Electrical Resistivity, Sound Velocity, Pseudopotential

1. 序 論

金属および合金の電気抵抗の温度依存性は温度センサあるいは加熱素子を開発する際の基礎として工業的に重要なだけでなく、原子振動(フォノン)による伝導電子の散乱を直接反映している物理量であり、固体の音速など材料の弾性特性を中心とする力学物性に対しても重要な知見を与えるものである⁽¹⁾。これまで固体中の伝導電子の散乱による電気抵抗理論の基礎として緩和時間 τ を求める Boltzman 方程式がよく知られており、単純金属(イオンコアが比較的小さく準自由電子近似の成り立つ金属)に対する具体的な電気抵抗率 ρ の計算方法として Ziman の式⁽²⁾⁽³⁾がしばしば使われている(以下、緩和時間法と略記する)。また、1957年 Kubo⁽⁴⁾は量子統計に基づく線形応答理論によって輸送現象を極めて一般的に扱う方法を提案している。この Kubo の式は理論的に厳密ではあるが、具体的な金属などに応用して伝導係数を求めるには複雑すぎるために十分な応用がなされていない。近年、Kubo の式を伝導係数の計算に利用できるように改良

する試みが進められており、その一つとして力-力時間相関関数の振動数微分から電気抵抗率 ρ を求める方法が Ünal⁽⁵⁾によって提案されている(以下、線形応答法と略記する)。

一方、ある温度 T における金属および合金の全体的な電気抵抗率 $\rho(T)$ はマティ-セン則に従うと、不純物あるいは格子欠陥、薄膜表面などの散乱による項 ρ_0 とフォノン散乱による項 $\rho_p(T)$ の和として、

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho_p(T) \dots\dots\dots (1)$$

で表される。右辺第1項は一般に温度に依存しない項であり、電気抵抗率の温度依存性は第2項のみで表される。

本研究はアルミニウムを中心とする単純金属について、上述の緩和時間法および線形応答法を使ってフォノン散乱による電気抵抗率の温度依存性を計算し、標準的な実験データと比較して計算方法の信頼性を検討したものである。どちらの方法にしても伝導電子の散乱ポテンシャルとフォノン振動数を必要とするが、散乱ポテンシャルとしては従来より著者ら⁽⁶⁾⁽⁷⁾の使用している Heine-Agarenkov 形の局所的擬ポテンシャルを使い、フォノン振動数は弾性係数から算出している。

このような計算方法が確立されれば、逆問題の取扱

* 原稿受付 1996年11月21日。

*¹ 正員、三重大学大学院 (〒514 津市上浜町1515)。*² 正員、三重大学工学部。

いによって、高圧力あるいは薄膜、微粒子などの極限条件下における電気抵抗率の測定から、直接測定することが困難な条件のもとでの音速および弾性係数あるいはデバイ温度などの力学的性質の変化を検討することが可能となる。本研究では、金属中の音速を評価し実験値と比較するによって本計算法の有用性を評価した。

2. 理論および計算方法

2.1 緩和時間法 単純金属に対して、最もよく使われている電気抵抗の温度依存性 $\rho(T)$ の計算式としては次の Boltzman 方程式から導かれた式^{(8)~(10)}が挙げられる。

$$\rho(T) = \frac{m}{nZe^2\tau^{-1}} \dots\dots\dots (2)$$

ここでは、 m は電子の質量、 e は電子の電荷、 n はイオンの密度、 Z は金属の原子価、 τ は緩和時間である。

擬ポテンシャル理論によると、緩和時間 τ は次のように計算される。

$$\tau^{-1} = \frac{3}{16\hbar m v_F^3 k_F^3} \int_0^{2k_F} q^3 a(q) \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \omega | \mathbf{k} \rangle dq \dots\dots\dots (3)$$

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \dots\dots\dots (4)$$

$$a(q) = \frac{V}{\Omega} s^2(q) \dots\dots\dots (5)$$

ただし、 \mathbf{k}, \mathbf{q} は電子の波数ベクトルであり、 ω はモデルポテンシャルである。この式の中には、 $q^3 a(q) \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \omega | \mathbf{k} \rangle$ の積分が含まれており、 $\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \omega | \mathbf{k} \rangle$ 、 $a(q)$ 、 k_F 、 v_F はそれぞれ擬ポテンシャルの形状因子、構造振幅、フェルミ波数とフェルミ速度であり、 N 、 V 、 Ω 、 $s(q)$ はそれぞれ伝導電子の総数、試料の容積、原子容積と原子構造因子である。そこで、 ρ は

$$\rho(T) = c \int_0^{2k_F} q^3 a(q) \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \omega | \mathbf{k} \rangle dq$$

$$c = \frac{3m}{16nZe^2\hbar m v_F^3 k_F^3} \dots\dots\dots (6)$$

となる。ただし、式(6)は擬ポテンシャルにより弱く散乱される伝導電子はその波数ベクトル \mathbf{k} がフェルミ球面上にあるという仮定のもとで建てられたものであり、そのため、式の積分を $0 \rightarrow 2k_F$ に限って計算しており、フェルミ球面外の伝導電子の電気抵抗の寄与を無視されている。この式(6)は Ziman の電気抵抗の計算式と呼ばれる。

2.2 線形応答法 有限温度において、一部分の伝導電子はフェルミ面の上に熱励起されており、フェ

ルミ球は完全に電子によって詰まっているわけではないので、フェルミ球面外に熱励起によって移動された伝導電子からの電気抵抗への寄与を考えなければならない。この点、Ziman の式は電気抵抗の温度依存性の計算にとって不十分であり、フェルミ球外伝導電子の寄与を考える場合および伝導電子がイオンから強く散乱を受ける場合には、他の電気抵抗の計算方法を用いなければならない。

線形応答理論から得られた Kubo の式は輸送現象において有効な示唆を与える。この理論により、Boltzman 方程式と違って、伝導係数の計算式が厳密に求められる。しかし、Kubo の式は解析に応用するには複雑であるので、Kubo の式を伝導係数を計算に利用できるよう改良する試みがなされてきた。近年、Ünal により、力-力時間相関関数の振動数微分から電気抵抗を求める計算式⁽⁵⁾が導かれた。

$$\rho = \frac{6}{e^2 N^2} \frac{V(a'(\omega))^2}{a''(\omega)} \dots\dots\dots (7)$$

この式の中で、 N は伝導電子の総数、 $a(\omega)$ は力-力相関関数であり、 $a'(\omega)$ 、 $a''(\omega)$ はその振動数に対する 1 階微分および 2 階微分である。

単純金属において、伝導電子とフォノンの相互作用は局所擬ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ により表される。

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} s(\mathbf{q}) \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | w | \mathbf{k} \rangle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \dots\dots\dots (8)$$

ここでは、 $a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ と $a_{\mathbf{k}}$ は伝導電子の $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ 状態の生成演算子および \mathbf{k} 状態の消滅演算子である。波数 \mathbf{k} 状態の運動エネルギーは

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \dots\dots\dots (9)$$

で示される。電子-フォノン系を二次量子化したハミルトニアン \hat{H} は次のように書き表される。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r}) \dots\dots\dots (10)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \dots\dots\dots (11)$$

ここで、 \hat{H}_0 は電子-フォノン間の相互作用のない系でのハミルトニアンであり、 $\omega_{\mathbf{q}}$ はフォノンの振動数であり、 $b_{\mathbf{q}}^\dagger$ と $b_{\mathbf{q}}$ はフォノンの生成演算子および消滅演算子である。また、電子系の x 方向の運動量 P_x は次の式で表される。

$$P_x = \sum_{\mathbf{k}} \hbar k_x a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \dots\dots\dots (12)$$

したがって、電子の散乱によって x 方向の受けた力 F_x は次のように表された。

$$F_x = -i \frac{1}{\hbar} [P_x, \hat{H}]$$

$$= i \frac{1}{\hbar} [V(\mathbf{r}), P_x]$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \dots\dots\dots (13)$$

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = -iq_x s(\mathbf{q}) \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | w | \mathbf{k} \rangle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \dots\dots\dots (14)$$

式(7)中の力-力時間相関関数 $a(\omega)$ は次の式で計算された⁽⁵⁾.

$$a(\omega) = \pi \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \hbar \frac{\delta(\hbar\omega - \Delta E)}{\Delta E} \langle [f_{\mathbf{k}}^*, f_{\mathbf{k}}] \rangle \dots\dots\dots (15)$$

ここで,

$$\Delta E = E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} \dots\dots\dots (16)$$

である。式(15)に Wick の定理⁽¹¹⁾ を用いて計算すれば、次のようになる。また、形状因子 $\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | w | \mathbf{k} \rangle$ は $w(q)$ で表示する。

$$a(\omega) = \pi \hbar \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} q_x^2 s^2(q) w^2(q) \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\Delta E} \delta(\hbar\omega - \Delta E) \dots\dots\dots (17)$$

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - E_f)} + 1} \dots\dots\dots (18)$$

$$n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_f)} + 1} \dots\dots\dots (19)$$

$n_{\mathbf{k}}, n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ は波数 $\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}$ 状態の伝導電子のフェルミ分布であり、 $\beta = 1/kT$, k は Boltzman 定数である。均質系に対して、 $q_x = q^2/3$ であるので、式(17)は次のようになる。

$$a(\omega) = -\frac{1}{3} \pi \hbar \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} q^2 s^2(q) w^2(q) \times \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\Delta E} \delta(\hbar\omega - \Delta E) \dots\dots\dots (20)$$

式(20)を用い、 $a'(0), a''(0)$ を次のように計算する。

$$a'(0) = -\frac{1}{3} \pi \hbar^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} q^2 s^2(q) w^2(q) \times \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\Delta E} \delta'(\Delta E) \dots\dots\dots (21)$$

$$a''(0) = -\frac{1}{3} \pi \hbar^3 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} q^2 s^2(q) w^2(q) \times \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\Delta E} \delta''(\Delta E) \dots\dots\dots (22)$$

ここで、 ΔE は次の式である。

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k q}{m} \cos(\theta) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \dots\dots\dots (23)$$

ここで、 θ は $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ と \mathbf{k} と成す角度である。 δ 関数の一次微分 δ' と二次微分 δ'' の式を使い、

$$\delta'[f(x)] = \frac{1}{f'^2(x_0)} \left[\delta'(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{f'(x_0)} \delta(x-x_0) \right] \dots\dots\dots (24)$$

$$\delta''[f(x)] = \frac{1}{f'^3(x_0)} \left[\delta''(x-x_0) + 3 \frac{f''(0)}{f'(0)} \delta'(x-x_0) + \frac{7 f''^2(x_0) - f'''(x_0) f'(x_0)}{f'^2(x_0)} \delta(x-x_0) \right] \dots\dots\dots (25)$$

$$\text{さらに、} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow (V/8 \pi^3)^2 \int d\mathbf{q}, \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (V/8 \pi^3)^2 \int d\mathbf{k}$$

とし、構造振幅と構造因子との関係式(5)を用い、また、 $Q = q/k_F$ を利用して、 $a'(0), a''(0)$ は次のように計算される。

$$a'(0) = \frac{V \beta^2 m^2 k_F^4 \Omega}{6 \pi \hbar^2} J_1 \dots\dots\dots (26)$$

$$a''(0) = \frac{V \beta^2 m^2 k_F^4 \Omega}{12 \pi^2 \hbar} J_2 \dots\dots\dots (27)$$

ここで、 J_1, J_2 は構造振幅 $a(Q)$ 、形状因子 $w(Q)$ およびそれらの微分 $a'(Q), w'(Q)$ を含んでいる積分であり、その計算式は次の式(28)と式(29)である。

$$J_1 = \int_0^\infty Q^3 a(Q) w^2(Q) \frac{y}{(1+y)^2} dQ \dots\dots\dots (28)$$

$$J_2 = \frac{1}{\beta E_F} \int_0^\infty Q a(Q) w^2(Q) \frac{y}{(1+y)^2} dQ + \frac{1}{\beta E_F} \int_0^\infty Q^3 a(Q) w'(Q) w(Q) \frac{2y}{(1+y)^2} dQ + \frac{1}{\beta E_F} \int_0^\infty Q^2 a'(Q) w^2(Q) \frac{2y}{(1+y)^2} dQ \dots\dots\dots (29)$$

ここで、 y は次の式で示される。

$$y = e^{\beta E_f(Q^2/4) - \beta E_f} \dots\dots\dots (30)$$

2.3 原子構造因子と擬ポテンシャル形状因子

本研究では、構造因子については、次の Helman のモデル構造振幅 $a(q)$ ⁽¹²⁾ を用いた。

$$a(q) = \frac{\beta \hbar^2 q^2}{2 M \cosh(\beta \hbar \omega(q)) - 1} \dots\dots\dots (31)$$

式中のフォノン分散 $\omega(q)$ を次の式に示す。

$$\omega(q) = \frac{2 v_s q_D}{\pi} \left| \sin\left(\frac{\pi q}{2 q_D}\right) \right| \dots\dots\dots (32)$$

$$\frac{4}{3} \pi q_D^3 = \frac{1}{4} \left(\frac{4 \pi}{a}\right)^3 \dots\dots\dots (33)$$

ここでは、 q_D はデバイ球半径、 v_s は音波の伝ば速度、 a は格子定数である。本計算では弾性係数 c_{11} から v_s を算出した。

$$v_s = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}} \dots\dots\dots (34)$$

ここで、 ρ は物質の密度である。

擬ポテンシャル形状因子 $w(q)$ について、本研究は Heine-Abarenkov 形モデル⁽⁶⁾⁽⁷⁾ を用いた。これは電子ガスによって遮へいされた伝導電子に働く実効ポテンシャルであり、裸のイオンポテンシャル $w^{\text{ion}}(q)$ と伝導電子系の誘電関数 $\epsilon(q)$ を用いて次のように表される。

$$w(q) = \frac{w^{\text{ion}}(q)}{\epsilon(q)} \dots\dots\dots (35)$$

$$w^{\text{ion}}(q) = \frac{8 \pi A}{\Omega q^3} [-q R_M \cos(q R_M) + \sin(q R_M)]$$

$$-\frac{8\pi Z}{\Omega q^2} \cos(qR_M) \dots\dots\dots (36)$$

ここで、 A はポテンシャルの深さ、 R_M はモデル半径。また、自由電子ガスに関する誘電関数 $\epsilon(q)$ はまた次のように表される。

$$\epsilon(q) = 1 - \frac{16\pi}{\Omega q^2} [1 - f(q)] \chi(q) \dots\dots\dots (37)$$

ここで、 $f(q)$ は交換相互作用および相関相互作用による補正関数であり、本計算では次の $f(q)$ を採用した。

$$f(q) = \frac{q^2/2}{q^2 + k_f^2 + 2k_f/\pi} \dots\dots\dots (38)$$

摂動特性 $\chi(q)$ は

$$\chi(q) = -\frac{3Z}{4k_f^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{4k_f^2 - q^2}{8qk_f} \ln \left| \frac{q + 2k_f}{q - 2k_f} \right| \right] \dots\dots\dots (39)$$

で与えられる。

具体的な計算に使用した金属のパラメータを表1に示す。

Table 1 Some parameters used by this calculation

Metal	k_F (au^{-1})	R_M (au)	A (au)	c_{11} (10^{11}N/m^2)
Na	0.4806	2.0078	0.08864	0.945
K	0.3878	3.0054	0.18658	0.457
Al	0.9273	1.3500	0.88149	10.82

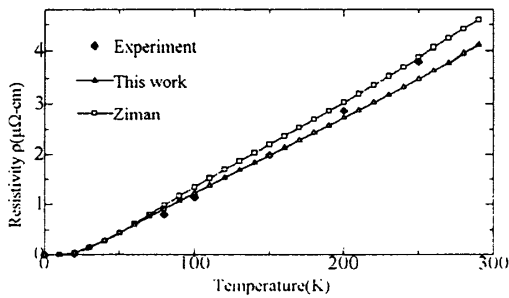


Fig. 1 Calculated Electrical Resistivity of Na

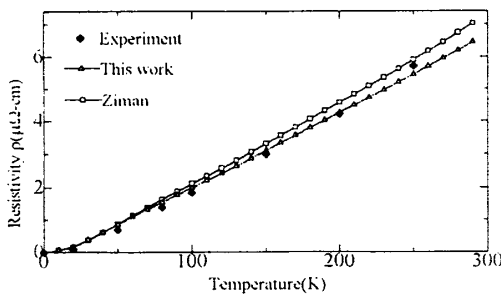


Fig. 2 Calculated Electrical Resistivity of K

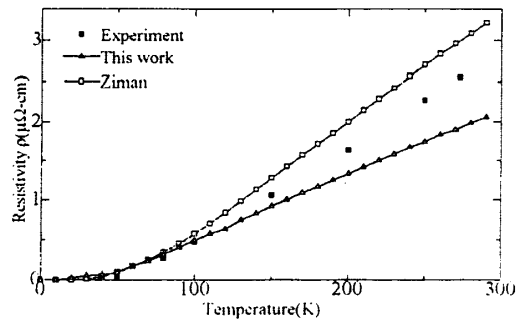


Fig. 3 Calculated Electrical Resistivity of Al

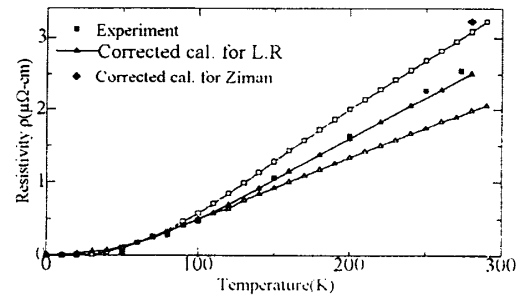


Fig. 4 Corrected Electrical Resistivity of Al

3. 計算の結果および考察

3・1 実験データとの比較 本研究は式(6)を用い、緩和時間法で Na, K, Al などの単純金属の電気抵抗 ρ の温度依存性の計算を行った。また、線形応答法を使って、式(26)と式(27)に対して数値積分を行い、 J_1, J_2 を計算し、 $\alpha'(0)$ と $\alpha''(0)$ を求め、そして、式(7)を用い、Na, K, Al などの単純金属の電気抵抗 ρ の温度依存性を計算した。なお、原子容積、フェルミ波数 k_f 、弾性係数 c_{11} などの温度依存性を無視し、0 K の値を使用し、計算を行った。

図1~3は Na, K, Al それぞれについて、緩和時間法と線形応答法による電気抵抗温度依存性の計算結果および実験値⁽¹³⁾のグラフを示すものである。計算値と実験値を比較すれば、かなり良い結果を得ることができたことがわかる。しかも、緩和時間法と線形応答法の計算結果はかなり接近している。これからフェルミ球面以上に熱励起された伝導電子の電気抵抗への寄与が小さいことがわかる。また、計算値と実験値の差の大きな Al についても、計算値は実験値の差が10%の範囲に入っている。

また、Al については、計算値と実験値の差が10%あり、特に温度が上昇するにつれ計算結果と実験値との差が大きくなっている。これは Al のデバイ温度 (430 K) が Na (140 K), K (85 K) に比べて大きいために、温度の上昇につれて Al の格子振動モードが大き

く増加する。したがって、Na, K に比べ Al が原子容積, c_{11} などの温度依存性による電気抵抗の変化が大きいことが挙げられる。原子容積と弾性係数の温度依存性を考慮したところ、図4に示すように、線形応答法による計算値は実験値とよく一致したが、緩和時間法による計算はもっと大きくずれる。そこで、デバイ温度の高い金属に対しては、線形応答法を使用して、原子容積と弾性係数の温度依存性を考慮すれば、より精度の高い計算が可能となることがわかった。

3.2 逆問題としての音速の評価 薄膜は機械性質はバルクに比べ、測定しにくい。その理由として、第一に挙げられるものは形状的理由である。試料の厚さが非常に薄いため、測定装置への取付けが難しく、引張試験や硬さ試験など測定自体不可能なものもある。第二に薄膜の物性測定には、基板が大きく関与し、硬さ試験や共振法によるヤング率測定などに大きな影響を与える。一方、電気抵抗率の測定はこれらの問題が存在しない。金属の場合、薄膜の電気抵抗測定は、十分に信頼性がある。電気抵抗率は電子の流れに対する格子振動、格子欠陥などの影響であり、基板が絶縁物である限り、基板からの影響はほとんど受けない。また、本計算では、音速を使って、構造因子を求め、電気抵抗の計算を行った。したがって、材料力学物性を反映する音速と材料の輸送特性を表す電気抵抗率との緊密な関係があることは明らかである。これは通常では困難な薄膜の弾性係数の測定に対して一つの方法を

示してくれる。すなわち、測定しやすい薄膜の電気抵抗の測定から音速を求め、さらに弾性係数を求める方法である。

低温領域、特にデバイ温度の五分の二以下の温度領域では、金属の電気抵抗は Bloch の T^5 則に依存しているとされる。図5は低温領域の Al の T^5 則による計算と線形応答理論による計算の比較のグラフである。

T^5 則の値は高温部で実験値と大きくずれることから、電気抵抗温度依存性の実験データはデバイ温度の五分の二以下の温度領域のものしか使うことができず、音速の温度依存性または弾性係数の温度依存性を推定することはできない。特に、 T^5 則による音速の推定の場合、低温での電気抵抗測定を必要とし、実験が困難なものも多い。

図6~8は Na, K, Al のそれぞれについての線形応答法による電気抵抗温度依存性の計算および標準電気抵抗温度依存性の実験データ⁽¹³⁾ から逆問題として音速温度依存性を求めたグラフを示すものである。計算

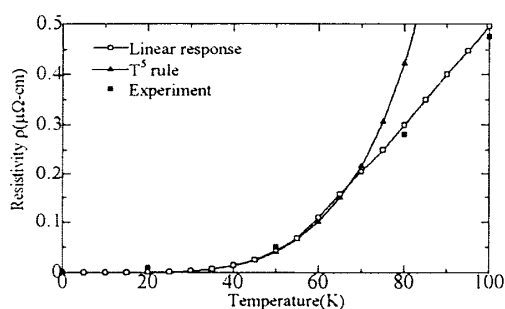


Fig. 5 The comparison between T^5 rule and Linear response calculation of Al

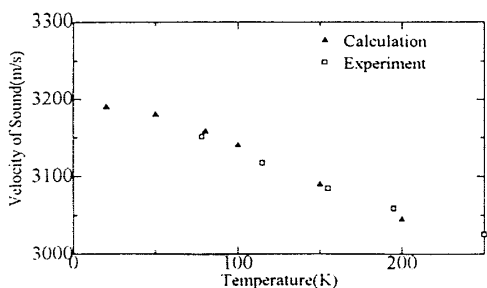


Fig. 6 Calculated Sound Velocity of Na

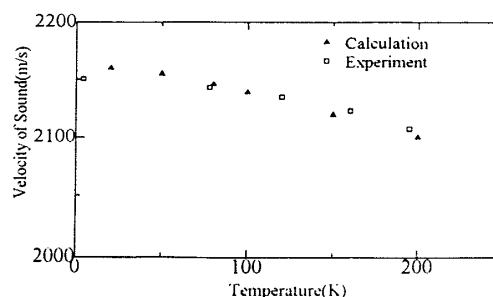


Fig. 7 Calculated Sound Velocity of Al

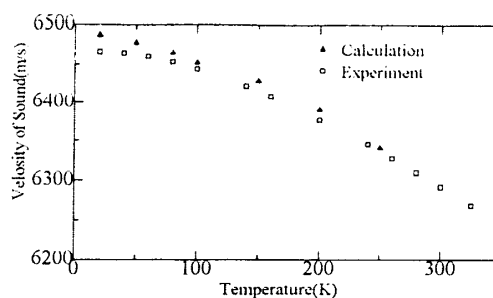


Fig. 8 Calculated Sound Velocity of Al

値と実験値を比較すればかなり良い一致を得ることができたことがわかる。

また、表2は室温電気抵抗温度依存性のこう配からの音速の計算値である。Alのようなデバイ温度の高い金属に対して、緩和時間法による計算値は実験値とずれるが、デバイ温度の低い金属に対する緩和時間法と線形応答法による計算値は実験値とよく一致し、この音速および弾性係数を求める方法は大きな実用価値があると考えられる。

4. 結 論

本研究では、擬ポテンシャルを伝導電子-フォノン相互作用のポテンシャルとして、緩和時間法から導いた式(6)と線形応答法から導いた式(7)を使って擬ポテンシャルの適用可能な金属Na, K, Alについて電気抵抗の温度依存性を計算した。実験結果と計算値は温度依存性について良い一致が得られた。電気抵抗の温度依存性の計算において、線形応答法はフェルミ球面上の伝導電子のみではなく、熱励起されたすべての伝導電子の電気抵抗への寄与を含め、考慮して計算したが、単純金属の場合、フェルミ球面以上に熱励起された伝導電子の電気抵抗への寄与は小さいため、二つの計算の違いは大きくなかった。また、Alのようなデバイ温度の高い金属に対して、線形応答法は緩和時間法や T^5 則に比べ、原子容積と弾性係数を高温までの温度依存性を考慮することにより、より精度の高い計算をすることができることを示した。

本計算では、音速を使って、構造因子を求め、電気抵抗の計算を行ったが、それとは逆に、これらの手法を用い、材料の力学物性を推定することが可能となる。本研究は線形応答法による電気抵抗温度依存性の計算および標準電気抵抗温度依存性の実験データから逆問題として実験値にかなり近い音速温度依存性を求めることができた。また、線形応答法による室温電気

抵抗温度依存性のこう配からの音速の計算値も実験値の差が非常に小さく、この音速および弾性係数を求める方法は測定困難な薄膜の弾性係数を求める方法として大きな実用価値があると考えられる。

以上の結果から、さまざまな材料に対して、電気抵抗の温度依存性の計算および逆問題として材料の音速さらに弾性係数の推定が可能となった。今後、これらの計算から、材料の極限状態(薄膜, 多層膜, 合金, 高圧力, 高温)下での力学物性の考察が期待される。

文 献

- (1) Rossiter, P. L., *The Electrical Resistivity of Metals and Alloys*, (1987), 65, Cambridge University Press, Cambridge.
- (2) Ziman, J. M., *Phys. Rev.*, **121** (1961), 1320-1328.
- (3) Ziman, J. M., *Adv. Phys.*, **10** (1961), 1-7.
- (4) Kubo, R., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **12** (1957), 570-576.
- (5) Únal, B. and Altanhan, T., *Progress of Theoretical Physics*, **88** (1992), 485-502.
- (6) Helman, J. S., *Phys. Rev.*, **B**, **6** (1972), 1607-1608.
- (7) 妹尾允史・ほか2名, *機論*, **50**-452, A(1984), 744-750.
- (8) Senoo, M., Mii, H. and Fujishiro, I., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **41** (1976), 1562-1569.
- (9) Ziman, J. M., *Electrons and Phonons*, (1960), 384, Clarendon Press, Oxford.
- (10) Bailyn, M., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 381-389.
- (11) Baym, G., *Phys. Rev.*, **135** (1964), A1691-1698.
- (12) Doniach, S., *Green's Functions For Solid State Physics*, (1974), 57, Lonton, Tokyo.
- (13) Dwight, E. Gray, *American Institute of Physics Handbook*, (1972), 9-41, McGraw-Hill Book Company.
- (14) Harrison, W. A., *Pseudopotentials in the Theory of Metals*, (1966), 276, Benjamin, New York.
- (15) Milinski, N., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **51** (1982), 3977-3984.
- (16) Milinski, N., *Progress of Theoretical Physics*, **85** (1991), 493-499.
- (17) Milinski, N., *Phys. Lett.*, **A**, **85** (1988), 393-398.
- (18) Milinski, N., *Progress of Theoretical Physics*, **80** (1988), 986-991.
- (19) Hayman, B. and Carbotte, J. P., *Canadian J. Phys.*, **49** (1972), 1952-1966.