

**САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ
ИЛМИЙ ДАРАЖА БЕРУВЧИ
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

ИМАМНАЗАРОВ ДАВРОН ХАМРАЕВИЧ

**ЎТКИНЧИ МЕТАЛЛ ПАРАМАГНИТ ҚОТИШМАЛАРНИНГ
ЭЛЕКТРОН СТРУКТУРАСИ ВА КИНЕТИК ХОССАЛАРИ**

01.04.09 – Магнит ҳодисалари физикаси

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси
АВТОРЕФЕРАТИ**

Самарқанд – 2022

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)
диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD) по
физико-математическим наукам**

**Content of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) on
physical-mathematical sciences**

Имамназаров Даврон Хамраевич

Ўткинчи металл парамагнит қотишмаларнинг электрон структураси ва
кинетик хоссалари 3

Имамназаров Даврон Хамраевич

Электронная структура и явления переноса парамагнитных сплавов
переходных металлов..... 23

Imamnazarov Davron Hamrayevich

The electronic structure and transport phenomena in paramagnetic alloys of
transition metals 43

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ

List of published works 47

**САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ
ИЛМИЙ ДАРАЖА БЕРУВЧИ
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

ИМАМНАЗАРОВ ДАВРОН ХАМРАЕВИЧ

**ЎТКИНЧИ МЕТАЛЛ ПАРАМАГНИТ ҚОТИШМАЛАРНИНГ
ЭЛЕКТРОН СТРУКТУРАСИ ВА КИНЕТИК ХОССАЛАРИ**

01.04.09 – Магнит ҳодисалари физикаси

**физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси
АВТОРЕФЕРАТИ**

Самарқанд– 2022

Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида №В2019.4.PhD/FM448 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Самарқанд давлат университетида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгашнинг веб-саҳифасида (www.samdu.uz) ва «Ziynet» Ахборот таълим порталида (www.ziynet.uz) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:	Қувондиқов Облоқул Қувондиқович физика-математика фанлари доктори, профессор
Расмий оппонентлар:	Эшпулатов Барот Эшпулатович физика-математика фанлари доктори, профессор Ибадов Рустам Мустафаевич физика-математика фанлари доктори, профессор
Етакчи ташкилот:	Бухоро давлат университети

Диссертация ҳимояси Самарқанд давлат университети ҳузуридаги PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 рақамли Илмий кенгашнинг 2022 йил « 4 » 03 соат 13⁰⁰ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 140104, Самарқанд шаҳри, Университет хиббони, 15 уй. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz Самарқанд давлат университети Физика факультети, 1-қават, 63-хона).

Диссертация билан Самарқанд давлат университетининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин 23 рақами билан рўйхатга олинган). (Манзил: 140104, Самарқанд шаҳри, Университет хиббони, 15 уй. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40).

Диссертация автореферати 2022 йил «16» 02 кунни тарқатилди.
(2022 йил «15» 02 даги 18- рақамли реестр баённомаси).



М.Х.Ашуров
Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш раиси,
ф.-м.ф.д., академик

Р.М.Ражабов
Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш илмий котиби,
ф.-м.ф.н., доцент

Д.И.Семенов
Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш
ҳузуридаги Илмий семинар раиси,
ф.-м.ф.д., доцент

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Жаҳонда ҳозирги вақтда электрон тузилиши жиҳатдан тартибли бўлмаган кристалл ва аморф қотишмаларнинг кинетик хоссаларини когерент потенциал усули (КПУ) ёрдамида ўрганиш конденсирланган ҳолат физикасининг асосий муаммоларидан бири бўлиб, илмий изланишлари тез ривожланаётган истиқболли йўналишлардан бири ҳисобланади. Кейинги вақтларда ўткинчи металллар (ЎМ) асосидаги парамагнит қотишмалар кинетик хоссалари (солиштирама электр қаршилик ва Холл эффекти)нинг концентрация ва температурага боғлиқ ҳолда ўзгаришларида кузатилаётган аномал физик хоссаларнинг мавжудлиги уларнинг электрон тузилишини назарий жиҳатдан ўрганишга катта қизиқиш уйғотмоқда.

Дунёда ЎМ лар асосидаги қотишмаларнинг назариясини яратишдаги қийинчиликлар, бу қотишмалар кристалл панжарасидаги даврий потенциалнинг йўқлиги ҳамда ЎМ нинг ўзига хос электрон тузилишига эга эканлиги билан боғлиқдир. Айниқса, электр қаршилик ва Холл коэффициентлари қотишмаларнинг электрон структурасига жуда сезгирлиги сабабли, бу эффектларни ўрганиш қотишмаларнинг электрон тузилиши ҳақида зарур маълумотларни олиш имконини беради. КПУ билан ўткинчи металллар асосидаги қотишмаларнинг электронлар ҳолат зичлиги ва кинетик хоссаларини заряд ташувчиларнинг сочилиши кучли бўлганда, sd-гибридланишни эътиборга олган ҳолда ўрганиш ва хулосалар қилиш долзарб масала бўлиб қолмоқда.

Мамлакатимизда фундаментал фанларнинг амалий ривожланишига, жумладан, саноатда кенг фойдаланиладиган ўткинчи металллар асосидаги тартибсиз ва аморф қотишмаларда юз берадиган физик ҳодисаларни тадқиқ қилишга катта эътибор қаратилмоқда. Шунинг учун бундай қотишмаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларини концентрация ҳамда температурага боғлиқ ҳолда ўзгаришларини ўрганиш долзарб вазифалардан бири бўлиб қолмоқда. Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2020 йил 29 декабрдаги Олий Мажлисга Мурожаатномасида¹ физика фанини ривожлантириш бўйича белгиланган вазифаларга мос фундаментал ва амалий масалаларни ҳал қилишга қаратилган илмий тадқиқотларни йўлга қўйиш муҳим аҳамият касб этмоқда.

Ушбу диссертация тадқиқоти Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2019 йил 8 октябрдаги ПФ-5847-сон “Ўзбекистон Республикаси олий таълим тизимини 2030 йилгача ривожлантириш концепциясини тасдиқлаш тўғрисида” ги Фармони, 2021 йил 19 мартдаги ПҚ-5032-сон “Физика соҳасидаги таълим сифатини ошириш ва илмий тадқиқотларни ривожлантириш чора-тадбирлари тўғрисида”, 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сон “Фанлар академияси фаолияти, илмий тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида”ги

¹ Мирзиёев Ш.М. Ўзбекистон Республикаси Президентининг Олий Мажлисга Мурожаатномаси // Халқ сўзи, 2020 йил, 30 декабрь, №275-276 (7746-7747), 1-бет.

қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Диссертация Республика фан ва технологиялар ривожланишининг II. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» устувор йўналиши доирасида амалга оширилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Сўнгги йилларда ўткинчи металллар асосидаги қотишмаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларини ўрганишга бағишланган тажриба ва назарий ишлар ортиб бормоқда. Бу илмий изланишлар тартибли системаларда кузатиладиган ва тартибсиз системалар учун характерли бўлмаган кенг кўламли кинетик хоссалар билан боғлиқдир.

Чет эл олимлари М.А.Новсон ва G.J.Morganлар (Англия) тартибсиз системаларда гибридлашувнинг электрон структура ва Холл коэффициентига таъсирини ўрганиб, аномал дисперсияли энергетик соҳада Холл коэффициентининг ишораси ўзгаришини кўрсатдилар. К.Левин (АҚШ), В.Великы (Чехия), Н.Еhrenreich (Англия), F.Brouers (Бельгия), М.Вrauwers (Франция) ва Н.Фукуяма (Япония)лар бинар кристалл қотишмаларда КПУёрдамида электронларнинг сочилиши кучли бўлганда солиштирма электр қаршилиқнинг концентрацияга боғлиқ ҳолда ўзгаришида Нордгейм қонуниятидан четланишларга олиб келишини кўрсатдилар ҳамда Холл коэффициенти когерент потенциалнинг мавҳум қисмига боғлиқ бўлмай, бир зонали моделда ўз ишорасини зонанинг марказида ва икки зонали s-d моделда эса d-зонадан чиқишда ўзгартиришини аниқлаганлар.

Рус олимлари Ю.П.Ирхин, Е.И.Кондорский, А.В.Ведяев, А.Б.Грановский, А.Н.Волошинскийлар кучли ўзаро таъсир ва гибридизациянинг қотишмаларнинг электрон структурасига ва кинетик хоссаларига таъсирини ўргандилар. Ушбу тадқиқотлар орқали аномал Холл коэффициентининг таъсири натижасида нормал Холл коэффициенти ўз ишорасини манфийдан мусбатга ўзгартириши мумкинлиги аниқланган ва бунда гибридизация ҳам асосий роль ўйнаши кўрсатиб берилган.

Ўзбекистонлик олимлар, хусусан проф. О.Қ.Қувондиқов, проф. У.Усаров, доц. И.Б.Субҳонқулов, доц. Н.Хамраев, доц. Р.М.Ражабовлар ушбу соҳани ривожлантиришга катта ҳисса қўшдилар. Улар конденсирланган ҳолат физикасининг кинетик ва магнит хоссаларини кенг миқёсда тадқиқ қилиб, кристалл ва аморф ҳолатдаги қотишмаларда турли хил сочилиш механизмларини концентрация ва температурага боғлиқ ҳолда ўзгаришларини ўргандилар.

Охириги йилларда чоп этилган адабиётлар шарҳи шуни кўрсатадики, тартибсиз системаларнинг электрон тузилиши ва кинетик хоссалари бўйича ягона назария яратилмаган, бундан ташқари гибридизация табиатининг қотишмалар электрон структурасига ва кинетик хоссаларига таъсири етарли даражада ўрганилмаган.

Диссертация тадқиқотининг диссертация бажарилган олий таълим муассасасининг илмий–тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация Самарқанд давлат университети илмий-тадқиқот ишлари режасига мувофиқ 2/7 d.q.r. 01860103966-рақамли “Ўткинчи ва сийрак ер металлари қотишмалари, интерметаллик бирикмалари, тоғ жинслари минералларининг электр, магнит ва гальваномагнит хоссаларини қаттиқ ва суюқ ҳолатда ўрганиш” мавзуси доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади. Тартибли бўлмаган кристалл ва аморф парамагнит қотишмаларда солиштирма электр қаршилик ва нормал Холл коэффициентини умумлаштирилган икки зонали гибридлашган s-d модел асосида заряд ташувчиларнинг сочилиши кучли ҳамда s-d гибридлашувни эътиборга олган ҳолда КПУ асосида назарий жиҳатдан ўрганиш, шунингдек, ЎМ асосидаги кристалл ва нокристалл парамагнит қотишмаларда классик магнитоқаршилик назариясини ўрганишдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

электронлар тезлигининг зоналараро матрица элементларини эътиборга олган ҳолда солиштирма электр ўтказувчанлик (СЭЎ) тензорининг диагонал ва нодиогонал ташкил этувлари учун умумий ифодаларни келтириб чиқариш ва уни таҳлил қилиш;

моделли ҳолатлар зичлиги - ярим эллиптик кўринишдаги Хаббард модели ва қотишмаларнинг реал ҳолатлар зичлиги учун сонли ҳисоблашларни амалга ошириш;

ўткинчи ва нодир металл асосидаги икки компонентали кристалл ва аморф қотишмаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларига гибридлашув ҳамда кучли сочилишнинг таъсирини ўрганиш;

ўткинчи металл қотишмаларда Лоренц кўринишидаги магнитоқаршилик учун умумий ифодани келтириб чиқариш ва уни эркин электронлар модели асосида таҳлил қилиш.

Тадқиқотнинг объекти сифатида ЎМ асосидаги кристалл ва аморф ҳолатдаги икки компонентали қотишмалар танлаб олинган.

Тадқиқотнинг предмети сифатида электронлар тезлигининг зоналараро матрица элементларини эътиборга олган ҳолда умумлашган s-d моделнинг когерент потенциал усулида СЭЎ ва Холл коэффициенти учун умумий ифодаларни келтириб чиқариш ҳамда кинетик хоссаларнинг концентрация ва температурага боғлиқ ҳолда ўзгаришларини ҳам модели, ҳам реал электрон ҳолатлар зичлиги учун аниқлаш, шунингдек, парамагнит қотишмаларда кучли сочилиш бўлган ҳолда классик магнитоқаршилик эффектларини назарий жиҳатдан ўрганишдан иборат.

Тадқиқотнинг усуллари. Диссертацияда Грин функцияси методи ва кўп каррали сочилиш назариясига асосланган КПУ дан ҳамда кинетик хоссаларни тавсифлашда Кубо-Гринвуд формуласидан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

икки зонали умумлаштирилган s-d моделнинг бир тугунли когерент потенциал усулида ўткинчи металл асосидаги тартибсиз парамагнит қотишларнинг солиштирма электр ўтказувчанлик σ , нормал Холл эффекти

коэффициенти R_0 учун назарий ҳисоблашлар бажарилган. Бунда ρ ва R_0 умумий ифодаларига тезликнинг зоналараро матрица элементлари билан боғлиқ бўлган тузатмалар киритилди;

маълум бир шароитларда гибридлашув билан боғлиқ бўлган кўшимча ҳадлар кичик бўлмай, қотишма таркибига кирувчи компоненталарнинг концентрацияси ўзгариши билан R_0 нинг ишораси манфийдан мусбатга ўзгариши кўрсатилган;

кучли сочилиш ва гибридлашувнинг таъсири натижасида солиштирма электр қаршилиқнинг концентрацияга боғлиқ ҳолда ўзгаришида Нордгейм қонуниятидан четланиш мавжудлиги аниқланган;

кучли сочилишнинг таъсири натижасида солиштирма электр қаршилиқнинг температурага боғлиқ ҳолда ўзгаришида Ферми энергиясининг d -зонанинг ичидаги жойлашишига қараб, унинг температура ошиши билан камайиши ёки ўзгармай қолиши аниқланган;

ЎМ асосидаги тартибсиз қотишмаларда классик магнетоқаршилиқ назарияси КПУ нинг бир зонали моделида ва Кубо формализми асосида ўрганилган. Бунда кўндаланг магнитоқаршилиқ дисперсия қонуни изотроп бўлган ҳолда, яъни заряд ташувчиларнинг сочилиши Борн характерида бўлмаган ҳолда нолга тенг бўлмаслиги ҳамда магнитоқаршилиқ сочилиш интенсивлиги ошиши билан Ферми сатҳининг ёйилишига мутаносиб равишда ўсиши аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижаси қуйидагилардан иборат:

олинган натижаларда ва ўрнатилган қонуниятларда кучли ўзаро таъсир ва гибридлашувнинг тартибсиз системаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларига таъсири сезиларли эканлиги кўрсатиб ўтилган;

олинган натижалар тартибсиз системаларнинг кинетик хоссаларини ўрганишнинг ривожига фундаментал аҳамиятга эга бўлиши бир вақтда кўпгина тажриба натижаларини тушунтириб беришда фойдаланиш мумкинлиги кўрсатилган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги. Тадқиқотда ўрганилган тартибсиз системаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларини тадқиқ қилишда қўлланилган КПУ математик усуллари афзаллиги; диссертация ишида олинган назарий натижаларнинг тажрибада кузатилган натижаларга ўзаро мос келганлиги; олинган натижаларнинг мавжуд физик тасаввурлар ва бошқа усуллар билан ҳамда илмий адабиётларда келтирилган маълумотларга зид келмаслиги билан тасдиқланган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти. Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти шундан иборатки, диссертация ишида тартибсиз кристалл ва аморф қотишмаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларининг ўзига хос хусусиятлари бўйича таҳлил қилинган назарий қарашлар натижалари тажрибада олинган концентрацион ва температуравий боғланишларни тушунтириб беришга имкон беради.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти шундаки, олинган натижалар тартибсиз системалар ҳақидаги физик тасаввурларни ривожлантиришга, мавжуд бўлган тажриба натижаларидан қотишмаларнинг микроскопик харак-

теристикаларини аниқлашда, солиштирма электр қаршилик ва Холл коэффициентларининг температурага ва концентрацияга боғлиқ ҳолда ўзгаришлари қонуниятлари бу эффектларни паст ва юқори температураларда олиб бориш зарурлигига хизмат қилади.

Тадқиқот натижаларининг амалиётга жорий қилиниши. Ўткинчи металллар асосидаги парамагнит қотишмаларнинг кристалл ва аморф ҳолатдаги электрон структураси ва кинетик хоссаларини ўрганиш бўйича олинган натижалар асосида:

sd-гибридлашувнинг ўткинчи металллар асосидаги аморф парамагнит қотишмаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларига таъсири натижалари 15–03–04182-рақамли “Фундаментальные закономерности процесса газофазного синтеза металлических нанокластеров, используемые методами многомасштабного компьютерного моделирования” фундаментал лойиҳаси доирасида бажарилган тадқиқотларда фойдаланилган (Россия ФА Урал Бўлими Металлургия институтининг тадқиқот далолатномаси). Илмий натижаларнинг қўлланилиши металл нанокластерларнинг ҳосил бўлиш механизмини тушунтириш ва уларнинг электрон структурасини моделлаштириш имконини берган;

электронларнинг дисперсия қонуни изотроп бўлиб, уларнинг сочилиши кучли бўлган ҳолда Лоренц магнитоқаршилиги электронлар ҳолатининг Ферми сатҳидаги сўнишига мутаносиб бўлиши натижасидан 2007-2011 йилларга мўлжалланган ИТД–14–027-рақамли «Ионлар имплантацияси ёрдамида ҳосил қилинган квант нуқтали наноматериаллардан Қуёш энергетикасида фойдаланиш» мавзусидаги амалий лойиҳада фойдаланилган. (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2020 йил 30 октябрдаги 89–03–4305-сон маълумотномаси). Олинган натижалар квант нуқтали наноматериалларнинг колоссаль магнитоқаршилигини баҳолаш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Диссертация ишининг натижалари 2 та халқаро конференция ва 5 та республика илмий-амалий анжуманларида маъруза қилинган ва муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги. Тадқиқот мавзуси бўйича жами 18 та илмий иш, шу жумладан Ўзбекистон Республикаси Олий Аттестация комиссиясининг диссертациялар асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрлар рўйхатида 11 та илмий мақола (4 та республика ва 7 та хорижий журналларда) чоп этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация кириш, тўртта боб, иккита илова, хулоса ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 33 та расм ва 5 та жадвални ўз ичига олган ҳолда 131 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Диссертациянинг “**Кириш**” қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланган, тадқиқотларнинг республика фан ва техника тараққиётининг асосий устивор йўналишлари билан боғлиқлиги аниқланган, муаммонинг ўрганилганлик даражаси, вазифа ва мақсаднинг шакллантирилганлиги, аниқланган объектлар, тадқиқот усули ва предмети, тадқиқотнинг илмий янгилиги тушунтирилган, олинган натижалар ишончлилигининг асосланганлиги, уларнинг назарий ва амалий аҳамияти очилганлиги, ишнинг апробацияси ва натижаларнинг жорий қилиниши ҳақида қисқача маълумотлар ҳамда диссертациянинг тузилиши ва ҳажми келтирилган.

Диссертациянинг “**Ўткинчи металллар асосидаги тартибсиз қотишмаларда кинетик ҳодисалар**” деб номланган биринчи бобида ўткинчи металллар асосидаги тартибли бўлмаган кристалл ва аморф қотишмаларнинг электрон структураси, солиштирама электр ўтказувчанлиги, термо-э.ю.к. ва Холл коэффицентларининг концентрацияга боғлиқлигига доир муҳим назарий ва экспериментал ишлар кўриб чиқилди. Биринчи боб охирида диссертация ишининг мақсади ва вазифалари келтирилган.

Диссертациянинг “**Тартибсиз қотишмаларнинг электр қаршилиги, термо-э.ю.к. ва Холл эффекти умумлашган s-d моделда**” деб номланган иккинчи бобида тартибсиз кристалл қотишмаларнинг электрон структураси, солиштирама электр қаршилиги ва НХЭ коэффиценти электронларнинг зоналараро тезликларини v_{sd} эътиборга олган ҳолда КПЯ да назарий ҳисоблашлар амалга оширилган. Бу ҳисоблашларнинг асосийсини солиштирама қаршилиқ ва Холл коэффиценти ташкил қилади. Маълумки, ферромагнит металлларда Холл майдони ва Холл қаршилигининг магнитланишга боғлиқлиги қуйидаги ифода билан аниқланади:

$$E_y = R_0 B_z j_x + R_s 4\pi M_z j_x; \quad \rho_H = E_y / j_x = R_0 B_z + R_s M_z \quad (1)$$

бунда B – магнит майдон индукцияси, M – магнитланиш катталиги, j – ток зичлиги, x, y, z – декарт координаталари. (1) ифодадаги биринчи ҳад Лоренц кучининг таъсири туфайли юзага келувчи НХЭ R_0 доимийси бўлиб, у кучсиз магнит майдони яқинланишида қуйидаги формула билан ҳисобланади:

$$R_0 = \frac{\sigma_{xy}(B)}{\sigma_{xx}^2 B}, \quad (2)$$

бунда σ_{xx} – магнит майдони нолга тенг бўлгандаги СЭЎ тензорининг диагональ ташкил этувчиси, σ_{xy} – эса магнит майдонидаги СЭЎ тензорининг нодиагональ ташкил этувчиси. (1) ифодадаги иккинчи ҳад эса аномал Холл эффекти (АХЭ) доимийси бўлиб, у ушбу ишда қараб чиқилмайди.

Диссертация ишининг асосини ташкил қилувчи бинар тартибсиз қотишмалар $A_x B_{1-x}$ ($y=1-x$) учун икки зонали гибридлашган модел келтирилган бўлиб, бу моделни иккиламчи квантланиш методининг Ваннье кўринишида қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{m \neq n} t_{mn}^s a_{sm}^+ a_{sn} + \sum_n \varepsilon_n^s a_{sn}^+ a_{sn} + \sum_{m \neq n} t_{mn}^d a_{dm}^+ a_{dn} +$$

$$+ \sum_n \varepsilon_n^d a_{dn}^+ a_{dn} + \sum_{m,n} \gamma_{mn} (a_{sm}^+ a_{dn} + a_{dm}^+ a_{sn}), \quad (3)$$

бунда s - и d – зона индекслари, $\varepsilon_n^{s(d)}$ – $s(d)$ -зонадаги сочилиш потенциаллари бўлиб, улар мос равишда x ва y эҳтимолият билан $\varepsilon_A^{s(d)}$ ва $\varepsilon_B^{s(d)}$ қийматларни қабул қилади, a_{in}^+, a_{in} ($i = s, d$) – i электроннинг n тугунда пайдо бўлиши ва йўқолиши оператори, $t_{mn}^{s(d)}$ – $s(d)$ -электроннинг сакраш интеграллари бўлиб, КПУ нинг бир тугунли вариантыда трансляцион-инвариант кўринишда эга бўлиб, электронлар дисперсия конунининг $\varepsilon_{s(d)}(k)$ в \mathbf{k} -фазодаги Фурье-образлари орқали аниқланади:

$$t_{mn}^{s(d)} = (1/N) \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{s(d)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \quad (4)$$

ва γ_{mn} – гибридлашув потенциалнинг матрица элементлари:

$$\gamma_{mn} = (1/N) \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \quad (5)$$

(3) гамильтонианнинг ўнг томонидаги биринчи иккита ҳад s -зонани бир зонали моделда, учинчи ва тўртинчи ҳадлар эса d -зонани бир зонали моделда ва сўнгги ҳади s - ва d -зоналар орасидаги гибридлашувни характерлайди. Электрон спектрини ҳисоблашда гибридлашув параметрини γ_{mn} квазиимпульсга \mathbf{k} боғлиқ эмас деб ҳисоблаймиз, лекин электр ўтказувчанлик ва Холл доимийсини ҳисоблашда тезликнинг зоналараро матрица элементларини ҳисобга оламиз. (3) гамильтонианга КПУда импульс \mathbf{k} га боғлиқ бўлмаган хусусий-энергетик қисмини $\Sigma(z)$ киритиб, ўртачалоштирилган Грин функцияларини $\langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle$ аниқлаймиз. $G_{\alpha\beta}(k, z)$ билан бундай эффектив муҳитнинг Грин функцияси $\langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle$ ўртасида қуйидаги муносабат ўринли, яъни:

$$G_{\alpha\beta}(k, z) = \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle + \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle T(z) \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle \quad (6)$$

бунда $T(z)$ – тўлиқ сочилиш матрицаси. (6) муносабатни ўртачалоштириш натижасида когерент потенциални $\Sigma(z)$ ўз-ўзига мослаштиришнинг шарти келиб чиқади, бунда сочилиш матрицаси $T(z)$ когерент потенциалга боғлиқ бўлади. Бир марказли яқинлашиш билан чегараланиб, $\langle T(z) = 0 \rangle$ шартдан, бир марказли сочилиш шарти сифатида қуйидагига эга бўламиз:

$$\tau(z) = x\tau^A(z) + y\tau^B(z) = 0, \quad (7)$$

бунда $\tau^A(z)$ ва $\tau^B(z)$ – икки қаторли матрицалар 2×2 :

$$\tau^{A(B)}(z) = \{1 - [\varepsilon^{A(B)} - \Sigma(z)]F(z)\}^{-1} [\varepsilon^{A(B)} - \Sigma(z)], \quad (8)$$

$$F(z) = \begin{vmatrix} F_{ss}(z) & F_{sd}(z) \\ F_{ds}(z) & F_{dd}(z) \end{vmatrix}, \quad (9)$$

бунда $F_{\alpha\beta}(z)$ – Грин функциясининг диагональ матрица элементлари бўлиб, улар ўртачалоштирилган Грин функциялари орқали аниқланади:

$$\langle G(k, z) \rangle = \langle (z - \mathcal{H}_0)^{-1} \rangle = \begin{vmatrix} z - \varepsilon_s(k) - \Sigma_{ss}(z) & -\Sigma_{sd}(z) \\ -\Sigma_{ds}(z) & z - \varepsilon_d(k) - \Sigma_{dd}(z) \end{vmatrix}^{-1}, \quad (10)$$

$$F(z) = \langle 0|G(z)|0 \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \sum_k \delta[\eta - \varepsilon_s(k)] G(\eta; z) = \int_{-\infty}^{\infty} g_0^s(\eta) G(\eta; z) d\eta. \quad (11)$$

Бу ерда Ванье скобкаси $|0\rangle$ икки компонентали векторни $\{|0\rangle_s, |0\rangle_d\}$ ифодалайди ва (11) ифода $F(z)$ функцияни гибриданмаган s -холоатлар зичлигининг бирлик холоатлар зичлигига нормаллаштирилган $g_0^s(\eta)$ функцияси билан интеграл боғланишини аниқлайди. (6-7) ифодалардан биринчи марта Совен томонидан киритилган КПУ да ўз-ўзини мослаштириш шартини ҳосил қилиш мумкин:

$$\Sigma(z) = \bar{\varepsilon} - [\varepsilon^A - \Sigma(z)]F(z)[\varepsilon^B - \Sigma(z)], \quad (12)$$

бунда $\bar{\varepsilon} = x\varepsilon^A + y\varepsilon^B$ ва

$$\varepsilon^{A(B)} = \begin{vmatrix} \varepsilon_s^{A(B)} & \gamma^{A(B)} \\ \gamma^{A(B)} & \varepsilon_d^{A(B)} \end{vmatrix}. \quad (13)$$

(6-7) шартлар бажарилганда, $G_{\alpha\beta}(k, z) = \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle$ бўлади, яъни қотишманинг конфигурацион-ўртачалаштирилган Грин функцияси эффектив муҳитнинг Грин функцияси билан мос тушади. $F_{\alpha\beta}(E^+)$ (11) ифодаси энди (12) муносабат билан бирлаштириб, ҳосил бўлган тенгламалар системасини итерация методи билан тўлиқ ўз-ўзига мослашгунча ечиш керак, бунда бошланғич кадамда $\Sigma(z) = \bar{\varepsilon}$ деб олинади.

Электронларнинг тўла холоатлар зичлиги

$$g(E) = g_s(E) + g_d(E) \quad (14)$$

бўлиб, унинг ташкил этувчилари қуйидагича аниқланади:

$$g_s(E) = -2\pi^{-1} \text{Im} F_{ss}(E^+) \quad (15)$$

$$g_d(E) = -10\pi^{-1} \text{Im} F_{dd}(E^+) \quad (16)$$

бунда 2 ва 10 кўпайтувчилари s - ва d -зоналардаги электронлар сони.

Диссертацияда (3) ифода билан аниқланган қотишма модели ва Кубо-Гринвуд формуласидан фойдаланган ҳолда кубик панжарали қотишмаларнинг статик электр ўтказувчанлиги σ_{xx} ва Холл ўтказувчанлиги $\sigma_{xy}(B)$ учун қуйидаги умумий ифодалар келтириб чиқарилган:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^{ss} + \sigma_{xx}^{dd} + 2\sigma_{xx}^{sd} + 2(\sigma_{xx}^{sd})', \quad (17)$$

бунда

$$\sigma_{xx}^{ss} = 2 \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{ss}^2(k) [\text{Im} G_{ss}(k, \eta^+)]^2, \quad (18)$$

$$\sigma_{xx}^{dd} = 10 \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{dd}^2(k) [\text{Im} G_{dd}(k, \eta^+)]^2, \quad (19)$$

$$\sigma_{xx}^{sd} = \sqrt{20} \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{ss}(k) v_{dd}(k) [\text{Im} G_{sd}(k, \eta^+)]^2, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xx}^{sd})' = & \sqrt{20} \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k \{ v_{sd}^2(k) [\text{Im} G_{ss}(k, \eta^+)] [\text{Im} G_{dd}(k, \eta^+)] + \\ & + 2v_{ss}(k) v_{sd}(k) [\text{Im} G_{ss}(k, \eta^+)] [\text{Im} G_{sd}(k, \eta^+)] + \end{aligned}$$

$$+2v_{dd}(k)v_{sd}(k)[ImG_{dd}(k, \eta^+)][ImG_{sd}(k, \eta^+)]. \quad (21)$$

ва

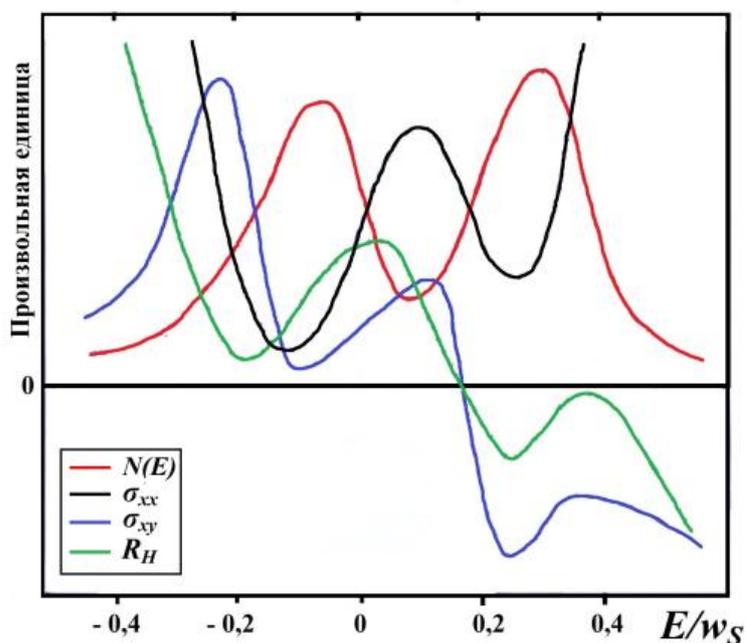
$$\begin{aligned} \langle \sigma_{xy}(B) \rangle = & \left(\frac{\hbar^2 e^3 B}{\pi^2 c \Omega} \right) \int d\eta \left(-\frac{df(\eta)}{d\eta} \right) \left\{ \sum_{\substack{k \\ \alpha\beta}} c_{\alpha\beta} [M_{xy\alpha\alpha}^{-1}(k)v_x^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\beta\beta}(k) - \right. \\ & - M_{xx\alpha\alpha}^{-1}(k)v_y^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\beta\beta}(k)] \Gamma_{\alpha\beta}(k; \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} + \\ & \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} 4c_{\alpha\beta} \{ [M_{xy\alpha\alpha}^{-1}(k)v_x^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\alpha\beta}(k) - M_{xx\alpha\alpha}^{-1}(k)v_y^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\alpha\beta}(k)] \times \\ & \times \Gamma_{\alpha\alpha}(k; \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} + \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} 4c_{\alpha\beta} [\frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x \partial k_y} v_x^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\beta\beta}(k) - \\ & - \frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x^2} v_x^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\beta\beta}(k)] \times \Gamma_{\alpha\alpha}(k; \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} + \\ & + \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} 2c_{\alpha\beta} \left[\frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x \partial k_y} v_x^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\alpha\beta}(k) - \frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x^2} v_y^{\alpha\alpha}(k)v_y^{\alpha\beta}(k) \right] \times \\ & \left. \times \Gamma_{\alpha\alpha}(k; \eta) \frac{\partial R_{\beta\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} \right\}, \quad (22) \end{aligned}$$

бунда e – электроннинг заряди, \hbar - на 2π га бўлинган Планк доимийси, Ω – системанинг ҳажми, $f(\eta)$ - Ферми-Дирак тақсимот функцияси, $c_{ss}=2$, $c_{sd}=c_{ds}=\sqrt{20}$, $c_{dd}=10$ – доимийлар; $\Gamma_{\alpha\beta}(k; \eta)$ ва $R_{\alpha\beta}(k; \eta)$ - Грин функциясининг $G_{\alpha\beta}(k; \eta)$ мавҳум ва реал қисмлари; $\Sigma_{\alpha 2}$ и $\Sigma_{\alpha 1}$ – когерент потенциалнинг $\Sigma_{\alpha\beta}$ мавҳум ва реал қисмлари; $\gamma(k)$ - гибридлашув потенциаллари; $\varepsilon_{\alpha}(k)$ - α -электронларнинг дисперсия қонуни; $M_{ij\alpha}^{-1}(k)$ – электронлар эффектив массалари тензорининг тескари қиймати бўлиб, у электронлар дисперсия қонунидан аниқланади, яъни: $M_{ij\alpha\alpha}^{-1}(k) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\alpha}(k)}{\partial k_i \partial k_j}$; $v_i^{\alpha\alpha}(k)$ ва $v_i^{\alpha\beta}(k)$ – мос равишда электронларнинг зоналар ичидаги ва зоналараро тезлигининг матрица элементлари бўлиб, улар дисперсия қонуни ва гибридлашув потенциалдан аниқланади: $v_i^{\alpha\alpha}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\alpha}(k)}{\partial k_i}$ ва $v_i^{\alpha\beta}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \gamma(k)}{\partial k_i}$ ($\alpha \neq \beta$ бўлганда); γ – гибридлашув доимийси.

Хусусий ҳолда битта s - ёки d -зона бўлганда юқоридаги формулалардан электр ўтказувчанликнинг σ Велицкий томонидан бир зонали қотишма моделида олинган ифодасини ҳосил қилиш мумкин. Иккита зонали гибридлашувсиз ($\gamma \rightarrow 0$) бўлган ҳолда σ_{sd} ва $(\sigma_{sd})'$ ҳадлар нолга тенг бўлиб, тўлиқ электр ўтказувчанлик σ ва Холл ўтказувчанлиги $\sigma_{sd}(H)$ s - ва d -зоналарнинг алоҳида-алоҳида олинган ташкил этувчилари йиғиндисига тенг бўлади, яъни: $\sigma = \sigma_{ss} + \sigma_{dd}$. Умумий ҳолда эса тезликнинг зоналараро матрица элементлари ҳисобга олинганда Грин функциясининг махражи комплекс

ўзгарувчига нисбатан тўртинчи даражадаги алгебраик тенглама бўлиб, унинг тўртта комплекс илдизларини аналитик кўринишда топишнинг иложи йўқ. Шунинг учун гибридлашув эътиборга олинганда, кучсиз сочилиш бўлганда ҳам сонли ҳисоблашларни амалга ошириш лозим бўлади.

Диссертациянинг учинчи боби “**Моделли ва ҳақиқий системаларнинг кинетик коэффицентларини ҳисоблаш**” га бағишланган бўлиб, модели ҳисоблашда қотишма таркибига кирувчи элементларнинг зона параметрлари Хаббарднинг ярим эллиптик кўринишдаги электронлар ҳолат зичлиги ҳамда электронлар тезлиги учун Велицкий ва Фукуяма томонидан келтирилган яқинланишларидан фойдаланилади. Бунда s - зонанинг ярим кенглиги $\omega_s=7$ эВ, s - ва d -зоналар ўртасидаги муносабат коэффиценти $\alpha=0,2$, s -зонадаги сочилиш параметри $\delta_s=1,4$ эВ, d -зонадаги сочилиш параметри $\delta_d=2,8$ эВ, гибридизация доимийси $\gamma=1$ эВ га тенг деб танлаб олинган. Моделли ҳисоблаш натижалари 1-расмда келтирилган.



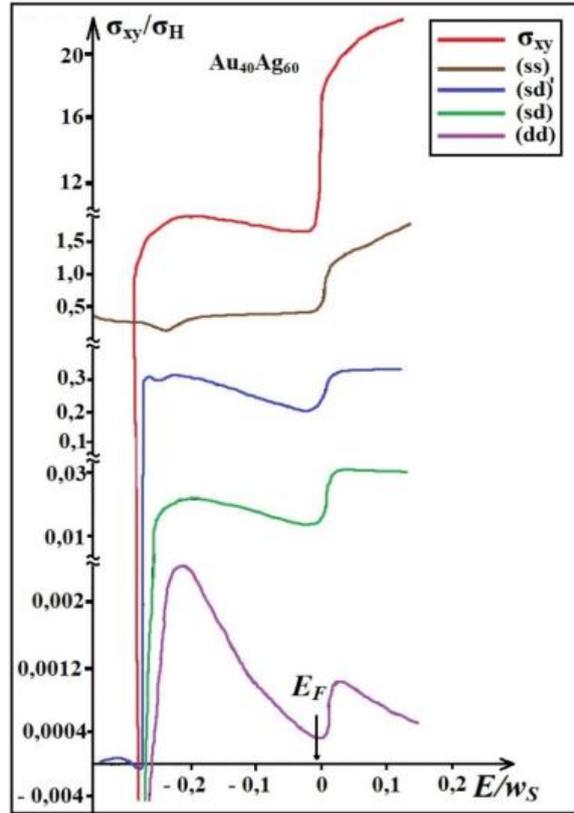
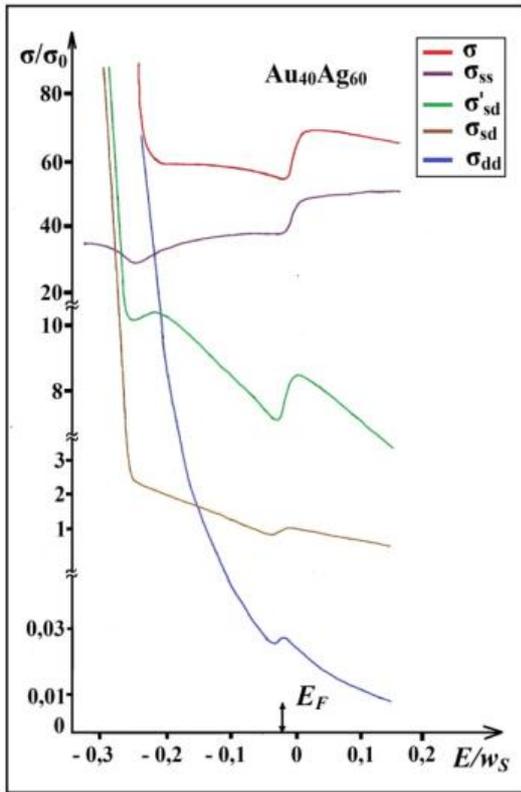
1-расм. Ҳолатлар зичлиги (—), электр ўтказувчанликнинг диагональ (—), электр ўтказувчанликнинг нодиагональ (—) тескари ишора билан ва Холл коэффицентининг (—) тескари ишора билан олинган қийматларининг Ферми сатҳи энергиясидан боғлиқлиги графиклари.

Расмдан кўринадики, ε^A и ε^B сатҳлар яқинида жойлашган d -ҳолатлар зичлиги чўққисидан узоқроқ энергиялар соҳасида диагональ электр ўтказувчанлик σ_{xx} нинг парциал ташкил этувчилари бир-биридан бир бирлик даражада фарқ қилганлиги учун тўла электр ўтказувчанлик максимал қийматга эга бўлади. Агар Ферми сатҳи d -резонанс сатҳлар атрофида бўлса, парциал ташкил этувчилар каттаклари бир хил тартибда таққосланарли даражада бўлади ва тўлиқ электр ўтказувчанлик нисбатан минимумга эришади, чунки $\varepsilon_F \approx \varepsilon^A$ ёки $\varepsilon_F \approx \varepsilon^B$ бўлганда катта d -ҳолатлар зичлиги билан билвосита sd -сочилишнинг биргаликдаги таъсири натижасидир. sd -ўзаро

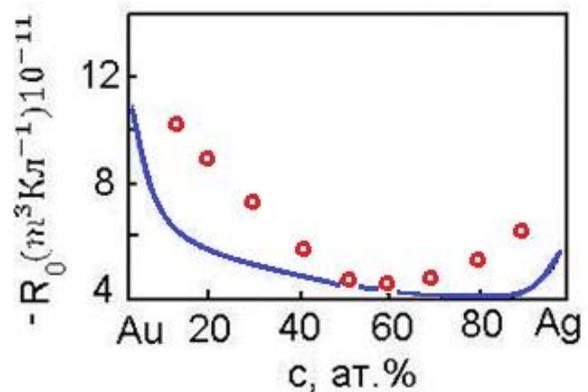
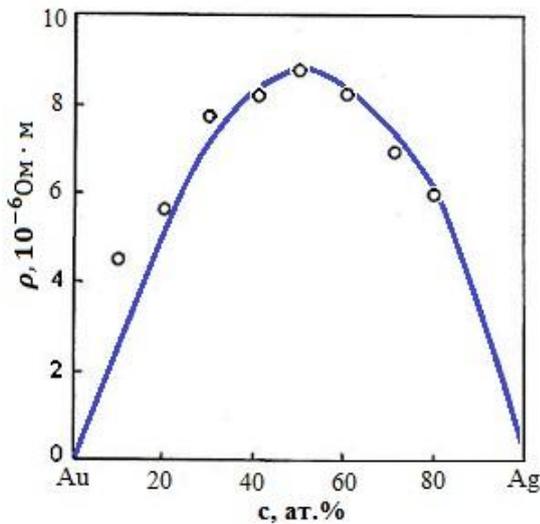
таъсир катта бўлганлиги сабабли улар s -электронларнинг в d -зонага эффектив сочилишига олиб келади ва ўтказувчанликнинг парциал ташкил этувчилари катталиклари бўйича таққосланарли даражада бўлади. Икки резонанс d -чўққилари орасидаги соҳада когерент потенциалнинг мавҳум қисми максимал қийматга эришади ва бу энергия соҳаларида ўтказувчанликнинг парциал ташкил этувчилари бир-биридан жуда катта фарқ қилади ($\sigma_{dd} \ll \sigma_{ss}$). Шунинг учун бу соҳада тўла электр ўтказувчанлик ўзининг нисбатан максимал қийматига эришади. Бу эса Броуэрс-Ведяевлар натижаларига мос келади. Нодиагонал электр ўтказувчанликнинг σ_{xy} Ферми энергиясидан боғлиқлиги Холл коэффициентининг R_0 катталиги ва ишорасига сезиларли даражада таъсир қилади ва Холл коэффициентининг ишораси s -зонанинг тубида манфий бўлиб, зонанинг чўққисида мусбат бўлади. Худди шундай натижалар бир зонали ва икки зонали моделларда ҳам кузатилган. Лекин у натижалардан фарқли равишда R_0 нинг ишора ўзгаришлари $\varepsilon_F \sim \varepsilon^B$ матрица атрофида юз беради, ваҳоланки, бир зонали моделда зонанинг марказида рўй берса, икки зонали моделда эса d -зонадан чиқишда юз беради. Бундай бўлишининг асосий сабаби йиғинди Холл ўтказувчанлиги σ_{xy} га айнан электронларнинг зоналараро тезлиги туфайли пайдо бўлган ҳадларнинг таъсири натижасидир.

Бу модел $\text{Au}_x\text{Ag}_{1-x}$ қотишмалари учун қўлланилиши куйида келтирилган. 2- ва 3-расмларда мос равишда СЭЎ тензорининг диагонал ва нодиагонал қисмлари ташкил этувчиларининг Ферми энергиясидан боғлиқлиги, шунингдек электр қаршилик ва Холл коэффициентининг концентрацияга боғлиқлиги графиклари келтирилган. 2-расмдан кўринадики, d -ҳолат ҳади Ферми энергияси сатҳининг d -чўққи томон силжиши билан ошиб бораверади ва ҳолатлар зичлигининг $N(E)$ максимал қийматлари атрофидаги соҳада асосий ҳад бўлиб қолади. Ферми энергиясининг ε_F исталган ҳолатида ушбу ишда биринчи марта олинган $(\sigma_{sd})'$ ҳад, гибридизацион ҳадга σ_{sd} қараганда катта бўлиб, у билан бир хил энергетик боғланишга эга. Бу ҳадлар σ_{sd} ва $(\sigma_{sd})'$ d -ҳолатлар тўлмаган ҳолда тез ошиб боради. Au-Ag қотишмаларида Ферми сатҳи d -чўққидан ташқарида жойлашган бўлишига қарамасдан, тўлиқ СЭЎ σ Ферми сатҳи ҳолатига кучли боғлиқ бўлади. Таҳлиллар шуни кўрсатадики, бу когерент потенциал ҳақиқий қисмининг $\text{Re}\Sigma_{aa}(E)$ шу энергиялар соҳасида кескин ўзгариши билан боғлиқ экан. 2-расмдан кўриш мумкинки, Ферми энергияси d -зонадан ташқарида бўлганда, йиғинди Холл ўтказувчанлиги σ_{xy} га кирувчи ҳамма ҳадлар манфий бўлиб қолади ва гибридизацион потенциалнинг \mathbf{k} -га боғлиқлигидан келиб чиққан $(\sigma_{sd})'$ ҳад σ_{sd} ҳаддан катта бўлади. d -зона чўққиси яқинида σ_{dd} ҳад мусбат бўлиб қолади, σ_{sd} ва $(\sigma_{sd})'$ ҳадлар эса турли хил энергетик боғлиқликка эга.

Солиштирма электр қаршилик $\rho = \sigma^{-1}$ ва Холл коэффициенти R_0 нинг концентрацияга боғлиқлигининг назарий ҳисоблашлари тажриба натижалари билан таққослаш шуни кўрсатадики, ҳисоблашлар модели бўлишига қарамасдан қониқарли натижага олиб келади. Шуни таъкидлаш жоизки, қотишма таркибига қараб тезликнинг зоналараро матрица элементлари билан боғлиқ бўлган ҳад 40-50% ни ташкил қилади.



2-расм. Au₄₀Ag₆₀ қотишмасы учун диагональ σ_{xx} (чапда) ва нодиагональ σ_{xy} (ўнгда) парциал ва тўлиқ СЭҶ ning энергияга боғлиқлиги графиклари.
 (бунда $\sigma_0 = \frac{4v_m^2 e^2 \hbar}{3\pi^2 \Omega}$, $\sigma_H = \frac{-2v_m^4 e^3 \hbar^2 B}{9\pi^3 c \Omega}$).



3-расм. Au_cAg_{1-c} қотишмаларда электр қаршилик ρ (чапда) ва Холл коэффициентини R_0 ning (ўнгда) концентрацияга боғлиқлиги:
 ○ – ҳисоблаш; — тажриба.

Ўткинчи металллар асосидаги бинар аморф қотишмаларда кинетик ҳодисаларни ҳисоблашда олдин КПУ да гибриланган $s-d$ модел учун нодиагональ тартибсизлик эътиборга олинган ҳолда эффектив қотишманинг бир заррачали Грин функцияси ҳисобланади. Бунда сакраш интегралли худди кристал-

лардаги каби битта ёки учта қийматни қабул қилмай, аморф қотишмаси атомларининг жуфт тақсимланиш функцияси орқали аниқланадиган Гаусс тақсимот функцияси ёрдамида узлуксиз қийматларни қабул қилади.

Ушбу йўл билан аниқланган аморф қотишмасининг электрон структура-си кейинчалик уларнинг кинетик хоссаларини ҳисоблашда кристалл қотишмалар учун ишлаб чиқилган ифодаларни қўллаш ёрдамида амалга оширилади.

Бундай қотишмаларнинг ҳолатлар зичлигини $N(E)$ ҳисоблаш натижалари шуни кўрсатадики, бунда $N(E)$ иккита чўққига ажралиб, *Cu* билан боғлиқ чўққи Ферми энергиясига нисбатан катта қийматга силжийди ва бирмунча тораяди. Ферми сатҳидаги аморф қотишмалар *Cu-Zr* нинг ҳолатлар зичлиги *Zr* нинг *d*-ҳолатлари билан аниқланади ва қотишма таркибидаги *Zr* нинг концентрацияси ошиб бориши билан у ҳам ошиб бораверади. Аморф қотишмаларда *Cu-Zr* *s*-ва *d*-зоналар кенгликлари турли хил бўлганлиги сабаб-ли нодиагонал тартибсизликларни келтириб чиқаради, бу эса *d*-электронлар-нинг энергетик жиҳатдан қайта тақсимланишига олиб келади ва миснинг *d*-электронлари валент зонанинг тубида, *Zr* нинг *d*-симметрияли электронлари эса Ферми сатҳи яқинида локаллашган бўлади (4-расм).

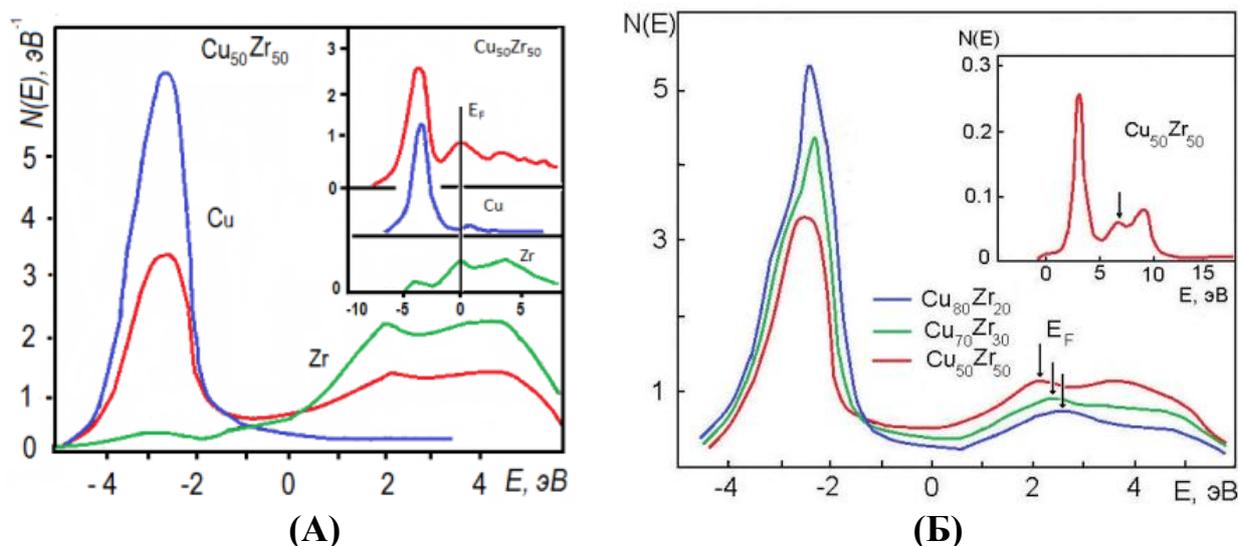
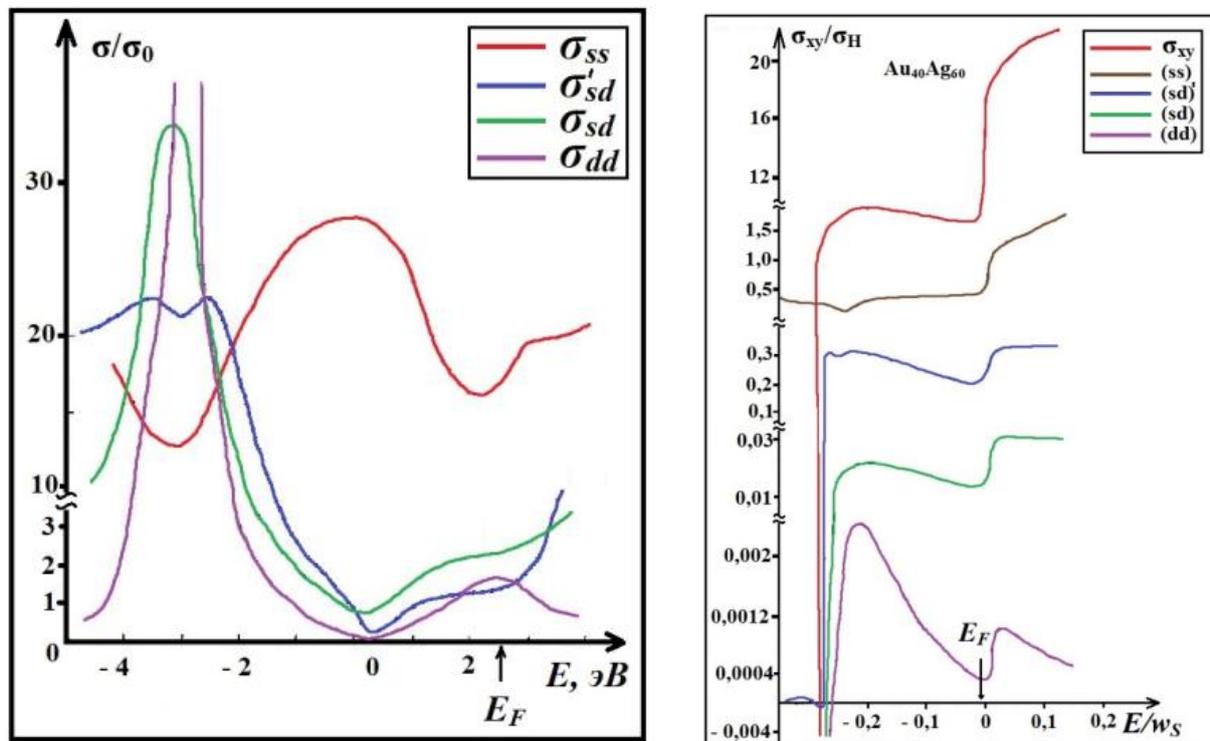


Рис. 4. Аморф қотишмалар *Cu-Zr* да парциал ва тўлиқ ҳолатлар зичлигининг эквивотом (А) ва учта концентрациялар учун (Б) энергетик боғлиқлиги графиклари. Вертикал чизиқлар қотишманинг Ферми сатҳини кўрсатади. Рамкачада ЛМТО методи ёрдамида $Cu_{50}Zr_{50}$ қотишмаси учун ҳисоблаш натижаси келтирилган.

Электр ўтказувчан-лик тензорининг диагонал ва нодиагонал қисмлари парциал ташкил этувчи-ларини ҳисоблаш натижалари шуни кўрсатадики (5-расм), *d*-ҳолатлар билан боғлиқ ҳад Ферми сатҳининг миснинг *d*-чўққиси томон силжиши билан тез ошиб борди, бу эса шу энергияга мос келувчи ҳолатлар зичлигининг катта бўлишидадир. Шунингдек, Ферми сатҳининг исталган ҳолатида электронлар тезлигининг зоналараро матрица элементлари билан боғлиқ бўлган ҳад $(\sigma_{sd})'$ гибридизацион σ_{sd} ҳад билан бир хил

тартибда бўлиб, у билан бир хил энергетик боғланишга эга. Ферми сатҳининг ҳақиқий ҳолатида (стрелка билан кўрсатилган) йиғинди электр ўтказувчанликка σ асосий ҳад бўлиб, d -ҳолат (σ_{dd}) ва гибридизацион (σ_{sd} и (σ_{sd})' ҳадлар эътиборга олмаслик даражада кичик бўлсада, s -ҳолат (σ_{ss}) ҳади ҳисобланади.

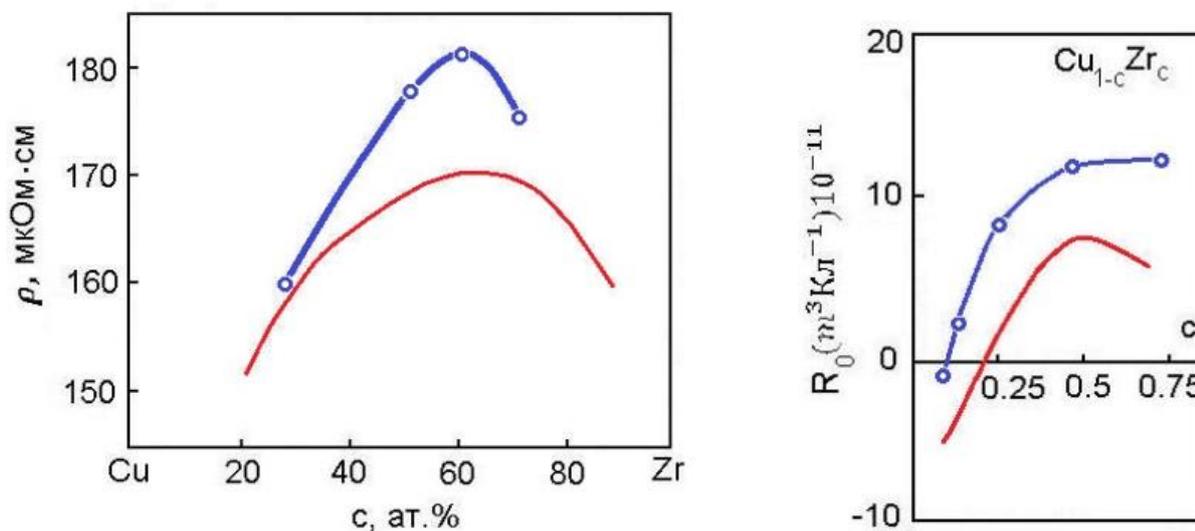


5-расм. $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$ қотишмаси учун электр ўтказувчанлик тензорининг диагональ σ_{xx} ва недиагональ σ_{xy} қисмлари ташкил этувчиларининг энергиядан боғлиқлик графиклари (бунда $\sigma_0 = \frac{4v_m^2 e^2 \hbar}{3\pi^2 \Omega}$, $\sigma_H = \frac{-2v_m^4 e^3 \hbar^2 B}{9\pi^3 c \Omega}$).

Бунга сабаб тўлиқ ҳолатлар зичлигига s -электронларнинг улуши кичик бўлса-да, уларнинг кучсиз сочилиши сабабли сўниши ($\tau \sim \frac{\hbar}{2\Delta}$) d -электронларнинг сўнишига қараганда кичик бўлишидадир.

σ_{xy} нинг ташкил этувчилари мураккаб энергетик боғланишга эга бўлиб, улар ҳолатлар зичлигининг энергияга боғлиқлиги билан корреляцион муносабатга эга эмас. Бунда σ_{xy}^{dd} ҳад Cu d -чўққисининг четларидан бўлак бошқа ҳамма энергия соҳаларида кичик. Шунинг учун R_0 нинг ишораси ва катталиги s -ҳолатнинг σ_{xy}^{ss} ҳади билан гибридизацион σ_{xy}^{sd} ва $(\sigma_{xy}^{sd})'$ ҳадларнинг йиғиндисидан иборат бўлади. Ферми сатҳи жойлашишининг ўзгариши ёки қотишма таркибининг ўзгариши билан σ_{xy} и R_0 ларнинг ишора ўзгаришлари турли хил энергетик боғлиқларга ҳамда қарама-қарши ишорали бўлган (σ_{xy}^{sd}) ҳаднинг ва σ_{xy}^{ss} ва σ_{xy}^{sd} ҳадларнинг таъсиридан бўлади. Бу эса Хоусон-Морганнинг s - d гибридлашув эффектлари туфайли ўткинчи металллар асосидаги қотишмаларда R_0 нинг ишораси ўзгариши мумкин деган қараши билан мос тушади. Аморф $\text{Cu}_x\text{Zr}_{1-x}$, $\text{Cu}_x\text{Ti}_{1-x}$ қотишмаларда ҳолатлар зичлиги, электр

қаршилик ва Холл эффеќтени ноѓаѓонал тарѓибсизликларни эѓтиборга олган ҳолда КПУ моделида ҳисоблашлар тажриба натижаларини тушунтириб беришга имкон бериши бу ҳисоблашларда фойдаланилган фаразларнинг тўѓрилигини исботлайди.



6-расм. Cu_xZr_{1-x} аморф қотишмаларда солиштирма электр қаршилик ρ ва Холл коэффицентининг R_0 концентрацияга боғлиқлиги:
 ----- – ҳисоблаш; \circ – тажриба.

Pd-Ag қотишмаларининг электр қаршилиги ва Холл коэффиценти реал электрон структуралар учун кўп зонали модел асосида КПУда ҳисоблаш натижалари Кубо формуласидан фойдаланган ҳолда қараб чиқилади.

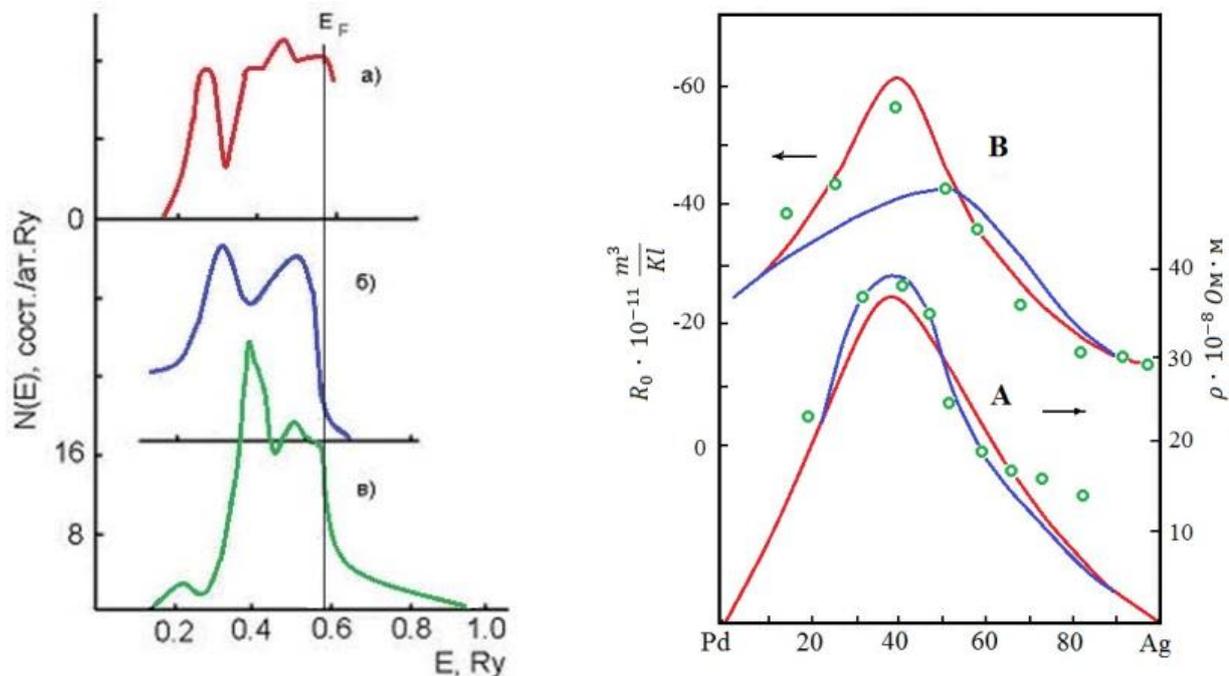
Қотишма Грин функциясининг мавҳум қисми $ImG_k^i(\epsilon)$ ва электрон спектри $\epsilon^i(k)$ аниқлаш учун зонали матрица гамильтониани қуйида келтирилган Ходжес-Эренрейх-Лангнинг интерполяцион моделидан фойдаланилади:

$$H_o = \begin{vmatrix} H_{ss} & H_{sd} \\ H_{ds} & H_{dd} \end{vmatrix}, \quad (23)$$

бунда H_{dd} ва H_{ss} мос равишда 5×5 - ва 4×4 -ўлчамли субматрицалар бўлиб, улар қўзғалган гибридланмаган d -зонани кучли боғланиш яқинланишида ва гибридланмаган s -зонани эркин электронлар яқинланишида ифодалайди. H_{sd} ва H_{ds} субматрицалар гибридлашув эффеќтларини ифодалайди. Интерполляция параметрлари компоненталар энергия қийматларининг ҳисобланган натижалари билан биринчи принцип асосидаги ҳисоблаш натижаларига мувофиқ келадиган шарт бўйича танлаб олинади. (23) матрицани диагоналлаштириш билан Pd иAg учун энергетик спектри Бриллюэн зонасининг 165 та таянч нуќталарида аниқланади ва интеграллашнинг тетраэдрон методидан фойдаланган ҳолда электронлар ҳолатлар зичлиги ҳисобланади. s - ва d -парциал ташкил этувчиларнинг оѓирлик марказлари қуйидаги формулалардан ҳисоблаб топилади:

$$\epsilon_i^j = \frac{\int_0^\infty N_i^j(E) E dE}{\int_0^\infty N_i^j(E) dE} \quad (24)$$

$N_i^j(E)$ ва ε_i^j ларнинг ҳисобланган қийматларидан фойдаланган ҳолда КПУ асосида қотишма ҳар бир зонаси учун парциал ва тўлиқ ҳолатлар зичлиги, когерент потенциал, Грин функцияси ва дисперсия конуни Ферми сатҳи яқинида ҳисобланади. Кейин сонли ҳисоблаш методидан фойдаланиб, тезлик ва эффектив масса компоненталари аниқланади.



7-расм. $Pd_{80}Ag_{20}$ қотишмасининг ҳолатлар зичлиги (чапда) ва Pd_xAg_{1-x} қотишмаларининг электр қаршилиги (А) билан Холл коэффиценти (В) нинг концентрацияга боғлиқлиги графиги (ўнгда):

○ – ККР-ПКП да ҳисоблаш; — — тажриба; — — ҳисоблаш

Ҳисоблаш натижалари 7-расмда келтирилган. Чапдаги расмдан кўринадики, ҳолатлар зичлигини ҳисоблашнинг бизлар қараб чиққан КПУ варианты фотоэмиссия бўйича олинган тажриба натижаларига қониқарли мувофиқ келади. Умуман олганда қаршилиқнинг концентрацияга боғлиқлиги тажриба натижаларига мос келади, Холл коэффицентининг концентрацияга боғлиқлиги фақатгина Ag га бой бўлган қотишмаларга мувофиқ келади. Назария билан тажриба ўртасидаги Pd га бой қотишмалардаги R қийматининг фарқ қилиши, бизнингча, σ_{xx} ва σ_{xy} ларни ҳисоблашда ўтказувчанликка фақат Ферми сиртининг Γ -марказлашган соҳасининг улуши қаралиб, Ферми сиртининг X ва W нуқталарни ўз ичига олган кўп боғламли тешикли соҳасининг улуши эътиборга олинмаганлиги сабаби бўлса керак.

Диссертациянинг тўртинчи боби “Ўткинчи металллар тартибсиз қотишмаларида Лоренц магнитоқаршилиги КПУ да” деб номланиб, унда тартибсиз парамагнит қотишмаларда классик (Лоренц) магнитоқаршилиқнинг назарияси бир зонали КПУда келтирилган. Кубо-Гринвуд формуласидан фойдаланиб, эркин электронлар модели ($N_0(E) = AE^{1/2}$) ни қўллаган

ҳолда кубик панжарали қотишмаларнинг кўндаланг магнетоқаршилиги учун қуйидаги умумий ифода келтириб чиқарилган:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{Кл} = \frac{\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(B=0)}{\rho_{xx}(B=0)} = \frac{1}{\sigma^{(0)}} \left[\sigma_{xx}^{(2)} + \frac{(\sigma_{xy}^{(1)})^2}{\sigma^{(0)}} \right], \quad (25)$$

бунда $\sigma^{(0)}$ – магнит майдони бўлмагандаги электр ўтказувчанлиги, $\sigma_{xy}^{(1)}$ – Холл электр ўтказувчанлиги ва $\sigma_{xx}^{(2)}$ – магнит майдони квадратага пропорционал бўлган электр ўтказувчанликка қўшимча ҳад бўлиб, қаралаётган модель учун қуйидаги кўринишга эга:

$$\sigma_{xy}^{(1)} = -(\omega\tau)\sigma^{(0)} \left[1 - d \cdot \frac{\Delta^2}{N^2} \right], \quad (26)$$

$$\sigma_{xx}^{(2)} = -(\omega\tau)^2\sigma^{(0)} \left[1 + a \frac{\Delta^2}{N^2} + b \frac{\Delta^4}{N^2} + c \frac{1}{N^2} \right] \quad (27)$$

бунда a , b , c ва d – сонли коэффициентлар, Δ – когерент потенциалнинг мавҳум қисми, N – қотишманинг ҳолатлар зичлиги, ω - Лармор частотаси, τ – релаксация вақти.

Сочилиш кучсиз бўлган ҳолда ($\delta \ll 1$, ва шуниндек, $\Delta/\varepsilon_F \ll 1$) Δ бўйича кичик яқинланишда, (25) ифодадан кўндаланг магнетоқаршилиқ классик назарияга мувофиқ нолга тенг бўлиши келиб чиқади. Энди сочилиш кучсиз ($\delta \ll 1$) бўлиб, лекин Ферми сатҳининг ёйилишини ҳамда (26) ва (27) ифодалардаги Δ бўйича биринчи қўшимча ҳадларни эътиборга олсак, у ҳолда Δ бўйича кейинги қўшимча ҳадни эътиборга олиш классик ифодадан четланишларга ва нотривиал натижага олиб келади: бу ҳолда магнетоқаршилиқ нолга тенг бўлмайди. Бунатижани қуйидагича изоҳлаш мумкин. Маълумки, Ферми сатҳида турли хил тезликларга эга бўлган икки хил кўринишдаги заряд ташувчилар мавжуд бўлганда, магнетоқаршилиқ чекли қийматга эга бўлади, чунки бундай ҳолда Холл майдони Лоренц кучининг таъсирини тўлиқ компенсация қила олмайди. Ферми сиртининг ёйилиши дегани бу ўтказувчанлик электронлари тезликларининг қандайдир биридан озгина фарқ қилувчи тўплами борлигини англатади.

Энди сочилиш кучсиз бўлмаган ҳолни қараб чиқамиз. У ҳолда (26-27) умумий ифодалардан фойдаланиш керак:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0}\right) = (\omega\tau)^2 \left[(a + 2d)a \frac{\Delta^2}{N^2} + \left(\frac{b}{N^2} - \frac{d^2}{N^4}\right) \Delta^4 + \frac{c}{N^2} \right] \quad (28)$$

бу эса $\Delta \sim \varepsilon_F$ да изотроп бўлган ҳолда ҳам қуйида келтирилган тартибда бўлади, яъни

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0}\right) \approx (\omega\tau)^2, \quad (29)$$

чунки квадрат қавслар ичидаги ҳадлар 1 тартибида бўлади.

Диссертацияда келтирилган (25-27) умумий ифоданинг таҳлили шуни кўрсатадики, магнетоқаршилиқ $\Delta\rho/\rho$ $(\omega\tau)^2 \sim \Delta\rho/\rho$ $(\omega\tau)^2$ тартибида бўлади ва сочилиш интенсивлигининг ўсиши билан ошиб боради. Яъни $\Delta\rho/\rho$ катталикнинг сезиларли даражада ўзгариши кузатилмади.

ХУЛОСА

Ўткинчи металлар асосидаги парамагнит қотишмаларнинг электрон структураси ва кинетик хоссаларини ўрганишда ўтказилган тадқиқотлар асосида қуйидаги хулосалар қилинди:

1. Ўткинчи металл қотишмаларида ўтказувчанлик ҳодисаларини ҳисоблашда умумлаштирилган $s-d$ модель таклиф этилиб, бунда электронлар тезлигининг зоналараро матрица элементлари v_{sd} ҳамда s -зонадаги сочилиш эътиборга олинди.

2. Умумлаштирилган $s-d$ моделнинг КПУ да солиштирма электр ўтказувчанлик ва нормал Холл коэффициентлари учун умумий ифодалар келтириб чиқарилди.

3. Ярим эллиптик кўринишдаги модели ҳолатлар зичлиги учун Ферми сатҳининг турли хил жойлашишида, кенг диапазонли концентрациялар ва сочилиш интенсивлигининг турли хил қийматларида солиштирма электр қаршилиқ ва Холл коэффициенти ўткинчи металл бинар қотишмаларда ҳисобланган. Электр ўтказувчанлик ва Холл эффектига гибридлашув билан d -ҳолатларнинг улуши сезиларли даражада катта эканлиги аниқланди. Шунингдек, Холл коэффициентининг мусбат ишорага эга бўлиши қотишма электрон структурасининг ўзига хос хусусиятларига боғлиқлиги кўрсатилди.

4. Модели ва реал ҳолатлар зичлиги доирасида электр қаршилиқ ва Холл эффекти кристалл қотишмалар Au-Ag, Pd-Ag, Au-Pd ва аморф қотишмаларда CuZr, CuTi ҳисобланди. Олинган ҳисоблаш натижалари тажриба натижаларига қониқарли мувофиқ келишига эришилди.

5. Тартибсиз қотишмаларда бир зонали когерент потенциал яқинланиши доирасида классик магнитоқаршилиқнинг назарияси яратилди. Бунда заряд ташувчиларнинг сочилиши Борн характерида бўлмасдан ва изотроп дисперсия қонуни ўринли бўлган ҳолда кўндаланг магнитоқаршилиқ нолга тенг бўлмаслиги аниқланди. Сочилиш интенсивлигининг ошиши билан магнитоқаршилиқ Ферми сиртининг ёйилишига мутаносиб равишда ўсиши аниқланди.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ПРИ
САМАРКАНДСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ**

САМАРКАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИМАМНАЗАРОВ ДАВРОН ХАМРАЕВИЧ

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА
ПАРАМАГНИТНЫХ СПЛАВОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ**

01.04.09 – Физика магнитных явлений

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2019.4.PhD/FM448.

Диссертация выполнена в Самаркандском государственном университете.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.samdu.uz) и на информационно-образовательном портале «Ziyouet» (www.ziyouet.uz).

Научный руководитель: Кувандилов Облакул Кувандилович
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: Эшпулатов Барот Эшпулатович
доктор физико-математических наук, профессор

Ибадов Рустам Мустафаевич
доктор физико-математических наук, профессор

Ведущая организация: Бухарский государственный университет

Защита диссертации состоится « 4 » 03 2022 г. в 13⁰⁰ часов на заседании Научного совета PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 при Самаркандском государственном университете. (Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский проспект, 15. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz Самаркандский государственный университет Физический факультет, 1-этаж, 63-аудитория).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Самаркандского государственного университета (зарегистрирована под №23. Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский проспект, 15.Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40.

Автореферат диссертации разослан « 16 » 02 2022 г.
(Протокол рассылки № 18 от « 15 » 02 2022 г.)



М.Х.Ашуров
Председатель Научного совета
по присуждению ученых степеней,
д.ф.-м.н., академик

Р.М.Ражабов
Ученый секретарь Научного совета
по присуждению ученых степеней,
к.ф.-м.н., доцент

Д.И.Семенов
Председатель научного семинара при Научном
совете по присуждению ученых степеней,
д.ф.-м.н., доцент

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В последние годы проведенные в мире исследования показали, что исследование явлений переноса в неупорядоченных кристаллических и аморфных сплавах методом когерентного потенциала (МКП) является одной из важнейших задач физики конденсированного состояния и является бурно развивающимся перспективным направлением научных исследований. В последнее время наблюдаемые в экспериментах по концентрационной и температурной зависимостям аномальных кинетических свойств (удельное сопротивление и эффект Холла) в парамагнитных неупорядоченных сплавах на основе переходных металлов подсказывают пути теоретического исследования их электронной структуры и кинетических свойств.

В мире трудности, возникающие при построении последовательной теории сплавов на основе переходных металлов, связаны как с отсутствием периодичности потенциала ионов кристаллической решетки сплава, так и с особенностями электронной структуры переходных металлов. В частности, величины электрического сопротивления и коэффициента Холла очень чувствительны к деталям электронной структуры сплавов. Поэтому изучение этих эффектов дают возможность определения параметров электронной структуры сплавов. В настоящее время теоретическое изучение электронной структуры и кинетических свойств методом когерентного потенциала неупорядоченных сплавов переходных металлов при сильном рассеянии токоносителей с учетом гибридизации состояний является актуальной задачей.

Большое внимание в нашей стране уделяется практическому развитию фундаментальных наук, в том числе изучению электронной структуры и аномальных кинетических свойств сплавов на основе переходных и благородных металлов. Поэтому возникла необходимость более детального изучения и более глубокого понимания физических явлений, происходящих в неупорядоченных кристаллических и некристаллических магнитных сплавах переходных металлов. Важно провести исследования, направленные на решение фундаментальных и практических вопросов в соответствии с задачами, поставленными в Послании Президента Республики Узбекистан Олий Мажлису² 29 декабря 2020 года.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач, предусмотренных в Постановлении Президента Республики Узбекистан от 19 марта 2021 г. № ПП-5032 «О мерах по повышению качества образования и совершенствованию научных исследований в области физики», постановлении № ПФ-5847 от 8 октября 2019 года «Об утверждении Концепции развития системы высшего образования Республики Узбекистана до 2030 года», 17 февраля 2017 г. № ПП-2789 «Деятельность Академии наук, организация научных исследований», постановлении «О

² Послание Президента Республики Узбекистан Шавката Мирзиёева Олий Мажлису // Народное слово 2020 г., 30 декабрь, №275-276 (7746-7747) С.1

мерах по дальнейшему совершенствованию управления и финансирования», а также в других нормативных актах, относящихся к этой деятельности.

Соответствие исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологий республики. Диссертация выполнена в рамках соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан – II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

Степень изученности проблемы. В последние годы наблюдается рост числа опубликованных экспериментальных и теоретических работ, посвященных изучению электронной структуры и кинетических свойств сплавов на основе переходных металлов. Эти научные исследования касаются широкого спектра кинетических свойств, которые наблюдаются в упорядоченных системах и не характерны для неупорядоченных систем.

Зарубежные ученые М.А.Howson и G.J.Morgan (Англия) изучили влияние гибридизации на электронную структуру и коэффициент Холла неупорядоченных систем и показали изменение знака коэффициента Холла в аномально дисперсионной энергетической зоне. K.Levin (США), B.Velicky (Чехия), H.Ehrenreich (Англия), F.Brouers (Бельгия), M.Brauwiers (Франция) и H.Fukuяama (Япония) провели исследования с помощью метода когерентного потенциала в случае сильного рассеяния электронов в бинарных кристаллических сплавах и показали, что электрическое сопротивление приводит к отклонениям от закона Нордхейма по отношению к концентрации, обнаружили, что коэффициент Холла не зависит от мнимой части когерентного потенциала и изменяет свой знак в центре зоны в однозонной модели и на выходе из d-зоны в двухзонной s-d модели.

Российские ученые Ю.П. Ирхин, Е.И. Кондорский, А.В. Ведяев, А.Б. Грановский, А.Н. Волошинский изучали в рамках приближения когерентного потенциала влияние сильного взаимодействия и гибридизации на электронную структуру и кинетические свойства сплавов. Эти исследования показали, что под действием аномальных коэффициентов Холла нормальный коэффициент Холла может менять свой знак с отрицательного на положительный, и гибридизация играет существенную роль в явлениях переноса.

Узбекские ученые, в частности, проф. О.К.Кувандиков, проф. У.Усаров, доц. И.Б.Субхонкулов, доц. Н.Хамраев, доц. Р.М.Раджабов внесли большой вклад в развитие этой области. Они изучили кинетические и магнитные свойства физики конденсированного состояния в крупном масштабе и изучили изменение различных механизмов рассеяния в сплавах в кристаллическом и аморфном состоянии в зависимости от концентрации и температуры.

Обзор литературы, опубликованной в последние годы, показывает, что не было разработано единой теории электронной структуры и кинетических свойств неупорядоченных систем, и что влияние природы гибридизации на электронную структуру и кинетические свойства сплавов не были адекватно изучены.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего учебного заведения, где выполнена

диссертационная работа. Диссертация выполнена в соответствии с планом научно-исследовательской работы Самаркандского государственного университета по теме: 2/7 d.q.r. 01860103966 «Изучение электрических, магнитных и гальваномагнитных свойств сплавов, интерметаллических соединений и минералов горных пород на основе переходных и редкоземельных металлов в твердом и жидком состояниях», реализованного в рамках фундаментального проекта.

Цель исследования. Теоретическое изучение электросопротивления и НЭХ в двухзонной $s-d$ модели ПКП кристаллических и аморфных парамагнитных сплавов при неборновском характере рассеяния носителей тока на случайном потенциале сплава с учетом $s-d$ гибридизации; построение теории классического магнитосопротивления в кристаллических и некристаллических парамагнитных сплавах переходных металлов.

Задачи исследования:

получить и проанализировать общие выражения для диагональной и недиагональной частей электропроводности с учетом межзонных матричных элементов скорости;

провести численные расчеты как для затравочной модельной Хаббардовской полуэллиптической плотности, так и для реальной плотности состояний сплава;

исследовать влияние гибридизации и сильного рассеяния на электронную структуру и кинетические свойства кристаллических и некристаллических бинарных сплавов переходных и благородных металлов;

получить и проанализировать выражения для Лоренцовского магнетосопротивления в сплавах переходных металлов.

Объектом исследования выбраны кристаллические и некристаллические бинарные сплавы замещения переходных и благородных металлов.

Предметом исследования является вывод общего выражения для электросопротивления и коэффициента НЭХ в модифицированной $s-d$ модели ПКП Ведяева-Броуэrsa с учетом межзонных матричных элементов скорости и рассеяния в s -зоне, исследование концентрационных и температурных зависимостей явлений переноса как для модельной, так и для реальной плотности состояний компонент сплава, а также теоретическое исследование в рамках ПКП классического (Лоренцовского) магнетосопротивления парамагнитных сплавов при сильном рассеянии.

Методы исследования. В диссертации использованы методы ПКП и формула Кубо-Гринвуда.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

в рамках предложенной обобщенной $s-d$ модели одноузельного приближения когерентного потенциала проведен расчет удельного электросопротивления ρ и коэффициента НЭХ R_0 кристаллических и некристаллических парамагнитных сплавов переходных металлов. Получены новые дополнительные члены в выражениях ρ и R_0 , связанные с межзонными матричными элементами скорости v_{sd} ;

показано, что при определенных условиях вклад, связанный с гибридизацией не является малым и может привести к значительному изменению знака R_0 с отрицательного на положительный при изменении концентраций одного из компонентов сплава;

определено отклонение от закона Нордгейма на концентрационной зависимости электрического сопротивления бинарных парамагнитных сплавов переходных металлов в зависимости от влияния сильного рассеяния и гибридизации;

определено влияние сильного рассеяния на температурную зависимость удельного электрического сопротивления, в котором электрическое сопротивление в зависимости от расположения уровня Ферми внутри d -зоны может уменьшаться или остаться постоянным с ростом температуры;

изучена теория классического магнетосопротивления неупорядоченных сплавов переходных металлов в рамках однозонной модели ПКП и формализма Кубо.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

полученные результаты имеют фундаментальное физическое значение в развитии изучения электронной структуры и явлений переноса в кристаллических и некристаллических системах;

развитая теория объясняет большое количество экспериментальных данных, стимулирует постановку новых экспериментов и теоретическое исследование других кинетических эффектов.

Достоверность результатов исследования заключается в том, что результаты диссертации получены с помощью апробированных методов теории твердого тела: ПКП, базирующего на аппарате функций Грина и формализме многократного рассеяния; формулы Кубо-Гринвуда, в рамках теории линейного отклика. Везде, где удается сопоставить результаты работы с экспериментом, имеется хорошее согласие с опытными данными, а также непротиворечивостью полученных результатов с физическими представлениями и сведениями, существующими в мировой научной литературе.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость результатов исследования заключается в том, что её результаты вносят вклад в развитие физических представлений об особенностях электронной структуры и явлений переноса в кристаллических и аморфных парамагнитных сплавах, позволяя объяснить экспериментальные данные по концентрационной и температурной зависимостям кинетических параметров кристаллических и аморфных сплавов.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что полученные результаты позволяют извлекать более полную информацию об их микроскопических характеристиках из имеющихся экспериментальных данных. В частности, показано, что в рамках предложенной модели можно провести расчет атомной структуры, затем на её основе электронной структуры и наконец, кинетические характеристики кристаллических и некристаллических сплавов.

Внедрение результатов исследования. На основе полученных результатов по исследованию электронной структуры и кинетических свойств кристаллических и аморфных сплавов переходных металлов в парамагнитном состоянии:

результаты исследований относительно влияния *sd*-гибридизации на электронную структуру и кинетические свойства аморфных парамагнитных сплавов были использованы при исследованиях по проекту РФФИ №15–03–04182 «Фундаментальные закономерности процесса газофазного синтеза металлических нанокластеров, исследуемые методами многомасштабного компьютерного моделирования» (акт внедрения из Metallургического института Уральского Отделения АН России от 05.09.20 г.). Применение научных результатов позволило объяснить механизмы получения металлических нанокластеров, а также дали возможность моделирования их электронной структуры;

результаты исследований относительно магнетосопротивления в случае изотропного закона дисперсии и при увеличении интенсивности рассеяния электронов, возрастающей пропорционально степени размытия поверхности Ферми были использованы при выполнении в 2007-2011гг. фундаментального гранта ИТД–14–027 «Использование квантовых точечных наноматериалов, полученных ионной имплантацией в Солнечной энергетике» (справка №89–03–4305 Министерства Высшего и Среднего Специального Образования Республики Узбекистан от 30 октября 2020 года). Результаты исследования дают возможность оценки полученных в рамках данного исследования величины колоссального магнетосопротивления квантовых точечных наноматериалов.

Апробация результатов исследования. Результаты диссертационного исследования были представлены и обсуждены на 2 международных и 5 республиканских научных конференциях.

Опубликованность результатов исследования. По теме исследования опубликовано 18 научных работ, в том числе 11 научных статей (4 в республиканских и 7 в зарубежных журналах) в научных изданиях, рекомендованных Высшей Аттестационной Комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертационных работ.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, двух приложений и списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 131 страниц, в том числе 33 рисунка и 5 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы актуальность и востребованность темы диссертации, определена связь исследований с основными приоритетными направлениями развития науки и технологий в республике, степень изученности проблемы, сформулированы цель и задачи, выявлены объекты, предмет и методы исследования, изложена научная новизна исследования, обос-

нована достоверность полученных результатов, раскрыта их теоретическая и практическая значимость, приведены краткие сведения о внедрении результатов и апробации работы, а также об объеме и структуре диссертации.

В первой главе диссертации «**Кинетические явления в неупорядоченных сплавах переходных металлов**» приводится обзор литературы по имеющимся на данный момент теоретическим и экспериментальным работам, связанным с особенностями гальваномагнитных свойств неупорядоченных кристаллических и некристаллических сплавов переходных металлов. В ней описаны некоторые требующие объяснения экспериментальные данные относительно кинетических эффектов в сплавах, дан обзор теоретических работ, посвященных исследованию НЭХ, из которого вытекает необходимость расчета этих эффектов в случае сильного рассеяния и гибридизации. Основное внимание в этой главе уделяется анализу различных подходов к теоретическому описанию явлений переноса в неупорядоченных сплавах. Из этого анализа следует, что одним из наиболее последовательных методом решения поставленных в диссертации задач является метод ПКП. Отмечено, что во всех разработанных ранее методах расчета электронной структуры и явлений переноса не принималось во внимание в гамильтониане межзонные матричные элементы скорости электронов и рассеяние в s-зоне.

Во второй главе «**Электросопротивление, термо-э.д.с. и эффект Холла в обобщенной s-d модели неупорядоченных сплавов**» произведен расчет электронной структуры, электросопротивления, термо-э.д.с. и коэффициента НЭХ неупорядоченных кристаллических сплавов в рамках ПКП с учетом межзонных матричных элементов скорости v_{sd} . Центральным в этой группе исследований является расчет НЭХ. Как известно, поле Холла и зависимость сопротивления Холла от намагниченности в ферромагнитных металлах может быть записано в виде:

$$E_y = R_0 B_z j_x + R_s 4\pi M_z j_x ; \quad \rho_H = E_y / j_x = R_0 B_z + 4\pi R_s M_z \quad (1)$$

Здесь B – магнитная индукция, M – намагниченность, j – плотность тока, x, y, z – декартовы координаты. Первое слагаемое в (1) имеет Лоренцевское происхождение и R_0 константа или коэффициент НЭХ, который в пределе слабого магнитного поля вычисляется по формуле:

$$R_0 = \frac{\sigma_{xy}(B)}{\sigma_{xx}^2 B}, \quad (2)$$

где σ_{xx} – диагональная компонента тензора электропроводности при отсутствии магнитного поля, а σ_{xy} – антисимметричная часть тензора электропроводности в присутствии магнитного поля. Второе слагаемое в (1) описывает аномальный эффект Холла (АЭХ), который в данной работе не рассматривается.

Гамильтониан двухзонной модели неупорядоченного бинарного сплава замещения $A_x B_y$ ($y=1-x$) с учетом гибридизации, являющаяся базовой в диссертационной работе записан в представлении Ванье в следующем виде:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{m \neq n} t_{mn}^s a_{sm}^+ a_{sn} + \sum_n \varepsilon_n^s a_{sn}^+ a_{sn} + \sum_{m \neq n} t_{mn}^d a_{dm}^+ a_{dn} + \sum_n \varepsilon_n^d a_{dn}^+ a_{dn} + \sum_{m,n} \gamma_{mn} (a_{sm}^+ a_{dn} + a_{dm}^+ a_{sn}), \quad (3)$$

где s - и d – индексы зон, $\varepsilon_n^{s(d)}$ – потенциалы рассеяния в $s(d)$ -зоне, принимающие значение $\varepsilon_A^{s(d)}$ и $\varepsilon_B^{s(d)}$ с вероятностью x и $y=1-x$, соответственно, a_{in}^+, a_{in} ($i = s, d$) – операторы рождения и уничтожения электрона в узле n , $t_{mn}^{s(d)}$ – интегралы перескока $s(d)$ -электронов, которые в одноузельном варианте ПКП считаются трансляционно-инвариантными и определяются Фурье-образами законов дисперсии электронов $\varepsilon_{s(d)}(k)$ в \mathbf{k} -пространстве

$$t_{mn}^{s(d)} = (1/N) \sum_k \varepsilon_{s(d)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \quad (4)$$

и γ_{mn} – матричные элементы гибридизационного потенциала:

$$\gamma_{mn} = (1/N) \sum_k \gamma(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \quad (5)$$

В гамильтониане (3) первые два члена в правой части описывают s -зону в однозонной модели, третий и четвертый члены описывают d -зону в однозонном приближении. Последний член характеризует гибридизацию между s - и d -зонами. При расчете электронного спектра параметр гибридизации γ_{mn} будем считать независимым от квазиимпульса \mathbf{k} , но при расчете электропроводности и константы Холла учтем наличие межзонных матричных элементов скорости. Вводя в гамильтониан (3) собственно-энергетическую часть $\Sigma(z)$ не зависящую в ПКП от импульса \mathbf{k} , определяем усредненные Гриновские функции $\langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle$. Так как функция Грина сплава $G_{\alpha\beta}(k, z)$ связана с функцией эффективной среды $\langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle$ соотношением

$$G_{\alpha\beta}(k, z) = \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle + \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle T(z) \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle \quad (6)$$

где $T(z)$ – полная матрица рассеяния, то из (6) при усреднении следует условие самосогласованного определения когерентного потенциала $\Sigma(z)$, от которого зависит матрица рассеяния $T(z)$. Ограничиваясь одноцентровым приближением, из условия $\langle T(z) = 0 \rangle$, получаем условие для одноцентровой матрицы рассеяния

$$\tau(z) = x\tau^A(z) + y\tau^B(z) = 0, \quad (7)$$

где $\tau^A(z)$ и $\tau^B(z)$ – двухрядные матрицы 2×2 :

$$\tau^{A(B)}(z) = \{1 - [\varepsilon^{A(B)} - \Sigma(z)]F(z)\}^{-1} [\varepsilon^{A(B)} - \Sigma(z)], \quad (8)$$

$$F(z) = \begin{vmatrix} F_{ss}(z) & F_{sd}(z) \\ F_{ds}(z) & F_{dd}(z) \end{vmatrix}, \quad (9)$$

где $F_{\alpha\beta}(z)$ – диагональные (по узлам кристаллической решетки) матричные элементы функции Грина, которые определяются через усредненные гриновские функции

$$\langle G(k, z) \rangle = \langle (z - \mathcal{H}_0)^{-1} \rangle = \begin{vmatrix} z - \varepsilon_s(k) - \Sigma_{ss}(z) & -\Sigma_{sd}(z) \\ -\Sigma_{ds}(z) & z - \varepsilon_d(k) - \Sigma_{dd}(z) \end{vmatrix}^{-1}, \quad (10)$$

$$F(z) = \langle 0|G(z)|0 \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \sum_k \delta[\eta - \varepsilon_s(k)] G(\eta; z) = \int_{-\infty}^{\infty} g_0^s(\eta) G(\eta; z) d\eta. \quad (11)$$

Здесь скобка Ванье $|0\rangle$ означает двухкомпонентный вектор $\{|0\rangle_s, |0\rangle_d\}$ и последнее выражение определяет интегральную связь функции $F(z)$ с $g_0^s(\eta)$, т.е. с нормированной на единицу плотностью состояний на узел в негибридизированной s -зоне. Из выражений (7-8) следует условие самосогласования ПКП в виде, впервые предложенном Совеном:

$$\Sigma(z) = \bar{\varepsilon} - [\varepsilon^A - \Sigma(z)]F(z)[\varepsilon^B - \Sigma(z)], \quad (12)$$

где $\bar{\varepsilon} = x\varepsilon^A + y\varepsilon^B$ и

$$\varepsilon^{A(B)} = \begin{vmatrix} \varepsilon_s^{A(B)} & \gamma^{A(B)} \\ \gamma^{A(B)} & \varepsilon_d^{A(B)} \end{vmatrix}. \quad (13)$$

При выполнении условия (7-8) получим $G_{\alpha\beta}(k, z) = \langle G_{\alpha\beta}(k, z) \rangle$, т.е. конфигурационно-усредненная функция Грина сплава совпадает с функцией Грина эффективной среды. Выражения для $F_{\alpha\beta}(E^+)$ (11) должны быть объединены с (12), и полученную систему уравнений необходимо решить итерационным путем до полного самосогласования, принимая на первом этапе $\Sigma(z) = \bar{\varepsilon}$.

Вклады s - и d -состояний в полную плотность состояний

$$g(E) = g_s(E) + g_d(E) \quad (14)$$

определяются как

$$g_s(E) = -2\pi^{-1} \text{Im} F_{ss}(E^+) \quad (15)$$

$$g_d(E) = -10\pi^{-1} \text{Im} F_{dd}(E^+) \quad (16)$$

где $E^+ = E + i0$. Множители 2 и 10 в выражениях (15–16) введены, чтобы учесть вырождение s - и d -зон.

В диссертации используя гамильтониан (3) и формулу Кубо-Гринвуда выведены общие выражения для статистической электропроводности σ_{xx} и холловской электропроводности $\sigma_{xy}(B)$ в сплаве с кубической решеткой:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^{ss} + \sigma_{xx}^{dd} + 2\sigma_{xx}^{sd} + 2(\sigma_{xx}^{sd})', \quad (17)$$

где

$$\sigma_{xx}^{ss} = 2 \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{ss}^2(k) [\text{Im} G_{ss}(k, \eta^+)]^2, \quad (18)$$

$$\sigma_{xx}^{dd} = 10 \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{dd}^2(k) [\text{Im} G_{dd}(k, \eta^+)]^2, \quad (19)$$

$$\sigma_{xx}^{sd} = \sqrt{20} \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{ss}(k) v_{dd}(k) [\text{Im} G_{sd}(k, \eta^+)]^2, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xx}^{sd})' = & \sqrt{20} \frac{2e^2 \hbar}{3\pi\Omega} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k \{ v_{sd}^2(k) [\text{Im} G_{ss}(k, \eta^+)] [\text{Im} G_{dd}(k, \eta^+)] + \\ & + 2v_{ss}(k) v_{sd}(k) [\text{Im} G_{ss}(k, \eta^+)] [\text{Im} G_{sd}(k, \eta^+)] + \end{aligned}$$

$$+2v_{dd}(k)v_{sd}(k)[ImG_{dd}(k, \eta^+)][ImG_{sd}(k, \eta^+)]. \quad (21)$$

и

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{xy}(B) \rangle = & \left(\frac{\hbar^2 e^3 B}{\pi^2 c \Omega} \right) \int d\eta \left(-\frac{df(\eta)}{d\eta} \right) \left\{ \sum_{\substack{k \\ \alpha\beta}} c_{\alpha\beta} [M_{xy\alpha\alpha}^{-1}(k) v_x^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\beta\beta}(k) - \right. \\ & - M_{xx\alpha\alpha}^{-1}(k) v_y^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\beta\beta}(k)] \Gamma_{\alpha\beta}(k; \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} + \\ & \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} 4c_{\alpha\beta} \{ [M_{xy\alpha\alpha}^{-1}(k) v_x^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\alpha\beta}(k) - M_{xx\alpha\alpha}^{-1}(k) v_y^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\alpha\beta}(k)] \times \\ & \times \Gamma_{\alpha\alpha}(k; \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} + \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} 4c_{\alpha\beta} [\frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x \partial k_y} v_x^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\beta\beta}(k) - \\ & - \frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x^2} v_x^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\beta\beta}(k)] \times \Gamma_{\alpha\alpha}(k; \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} + \\ & + \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} 2c_{\alpha\beta} \left[\frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x \partial k_y} v_x^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\alpha\beta}(k) - \frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k_x^2} v_y^{\alpha\alpha}(k) v_y^{\alpha\beta}(k) \right] \times \\ & \left. \times \Gamma_{\alpha\alpha}(k; \eta) \frac{\partial R_{\beta\beta}(k; \eta)}{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)} \right\}, \quad (22) \end{aligned}$$

где e – заряд электрона, \hbar – постоянная Планка, деленная на 2π , Ω – объём системы, $f(\eta)$ – функция распределения Ферми-Дирака, $c_{ss}=2$, $c_{sd}=c_{ds}=\sqrt{20}$, $c_{dd}=10$ – постоянные, которые учитывают вырождение s - и d -зон; $\Gamma_{\alpha\beta}(k; \eta)$ и $R_{\alpha\beta}(k; \eta)$ – мнимая и реальные части гриновской функции $G_{\alpha\beta}(k; \eta)$; $\Sigma_{\alpha 2}$ и $\Sigma_{\alpha 1}$ – мнимая и реальная часть когерентного потенциала $\Sigma_{\alpha\beta}$; $\gamma(k)$ – гибридизационный потенциал; $\varepsilon_{\alpha}(k)$ – закон дисперсии α -электронов; $M_{ij\alpha}^{-1}(k)$ – величина обратного тензора эффективной массы электронов, которая определяется из закона дисперсии электронов $M_{ija\alpha}^{-1}(k) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\alpha}(k)}{\partial k_i \partial k_j}$, $v_i^{\alpha\alpha}(k)$ и $v_i^{\alpha\beta}(k)$ – соответственно внутризонные и межзонные матричные элементы скорости электронов, определяемые из закона дисперсии и гибридизационные потенциалы как $v_i^{\alpha\alpha}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\alpha\alpha}(k)}{\partial k_i}$ и $v_i^{\alpha\beta}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \gamma(k)}{\partial k_i}$ (при $\alpha \neq \beta$); γ – константа гибридизации.

Дополнительные вклады, которые связаны с межзонными матричными элементами скорости v_{sd} нетрудно видеть, что они того же порядка γ^2 , что и член, полученный в работе Броуэrsa-Ведяева. В предельных случаях одной s - или d -зоны из формул (17-21, 32) легко получить выражение для электропроводности σ однозонной модели сплава Велицкого. При наличии двух зон без гибридизации ($\gamma \rightarrow 0$), вклады σ_{sd} и $(\sigma_{sd})'$ равны нулю и полная электропроводность равна сумме от вкладов s - и d -зон в отдельности, т.е. $\sigma = \sigma_{ss} + \sigma_{dd}$. В общем случае знаменатель Гриновской функции является алгебраическим

уравнением четвертого порядка относительно комплексной переменной, и решить его в чисто аналитическом виде для определения четырех комплексных корней невозможно. Поэтому при наличии гибридизации требуется численный расчет, даже в случае слабого рассеяния.

В третьей главе диссертации «Численные расчеты кинетических коэффициентов для модельных и реальных систем» приводятся результаты исследования как модельной, так и реальной системы ряда парамагнитных кристаллических и аморфных сплавов переходных металлов. Для проведения модельных численных расчетов воспользуемся зонными параметрами плотности состояний негибридизированной s -зоны, который имеет Хаббардовское полуэллиптическую форму и воспользуемся формулами для скорости электронов приближениями Велицкого и Фукуямы.

Далее при расчете примем следующие значения: полуширина s -зоны $\omega_s=7$ эВ, отношение s - и d -зон равно $\alpha=0,2$, величина рассеяния в s -зоне $\delta_s=1,4$ эВ, величина рассеяния в d -зоне $\delta_d=2,8$ эВ, константу гибридизации $\gamma=1$ эВ. Результаты модельного расчета приведены на рис. 1. Как видно из рисунка, в области энергий вдали от пиков плотности d -состояний, расположенных вблизи уровней ε^A и ε^B , парциальные вклады в диагональную проводимость σ_{xx} отличаются друг от друга примерно на порядок. Поэтому полная проводимость имеет максимальное значение.

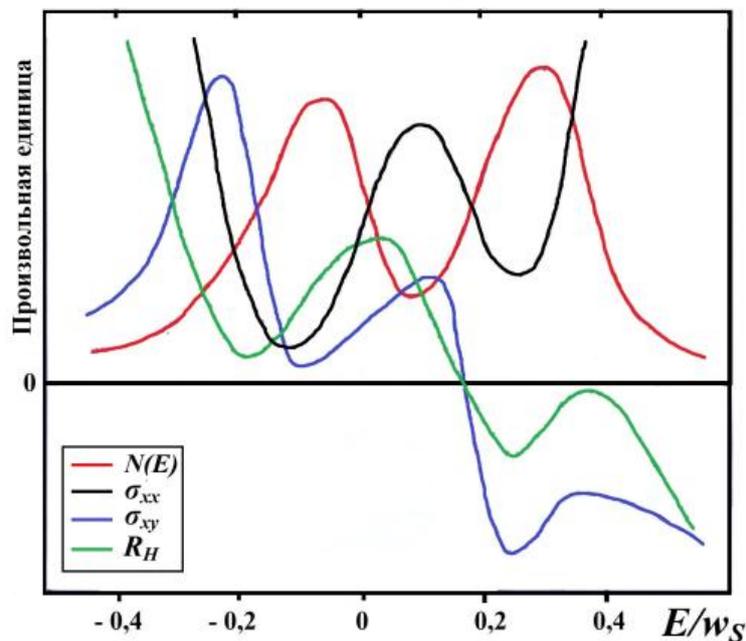


Рис.1. Зависимость плотности состояний (—), диагональной электрической проводимости (—), недиагональной электрической проводимости (—) с обратным знаком и коэффициента Холла (—) с обратным знаком в зависимости от уровня Ферми.

Если уровень Ферми находится в окрестности резонансных d -уровней, парциальные вклады сравнимы по порядку величины и полная проводимость

достигает относительного минимума, так как при $\varepsilon_F \approx \varepsilon^A$ или $\varepsilon_F \approx \varepsilon^B$, сказывается совместное влияние большой плотности d -состояний и sd -рассеяния. Довольно большое sd -взаимодействие обуславливает эффективность рассеяния s -электронов в d -зону и поэтому парциальные вклады в проводимость в этом случае сравниваются по величине. В области энергий между двумя резонансными d -пиками мнимая часть когерентного потенциала достигает максимума, и следовательно, в этой области энергий парциальные вклады в проводимость сильно различаются ($\sigma_{dd} \ll \sigma_{ss}$). Поэтому в этой области полная проводимость достигает относительного максимума. Это хорошо согласуется с расчетами Броуэrsa-Ведяева. Поведение недиагональной электропроводности σ_{xy} в зависимости от энергии Ферми определяет поведение коэффициента Холла R_0 , знак которого является отрицательным на дне s -зоны и положительным на вершине. Аналогичное поведение коэффициента Холла также наблюдается в однозонной модели и двухзонной моделях. Но в отличие от этих расчетов изменение знака R_0 происходит в окрестности матрицы $\varepsilon_F \approx \varepsilon^B$, тогда как в однозонной модели в центре зоны, а в двухзонной – при выходе из d -зоны. Это связано именно впервые учтенным вкладом в σ_{xy} , связанном с межзонными матричными элементами скорости электронов v_{sd} .

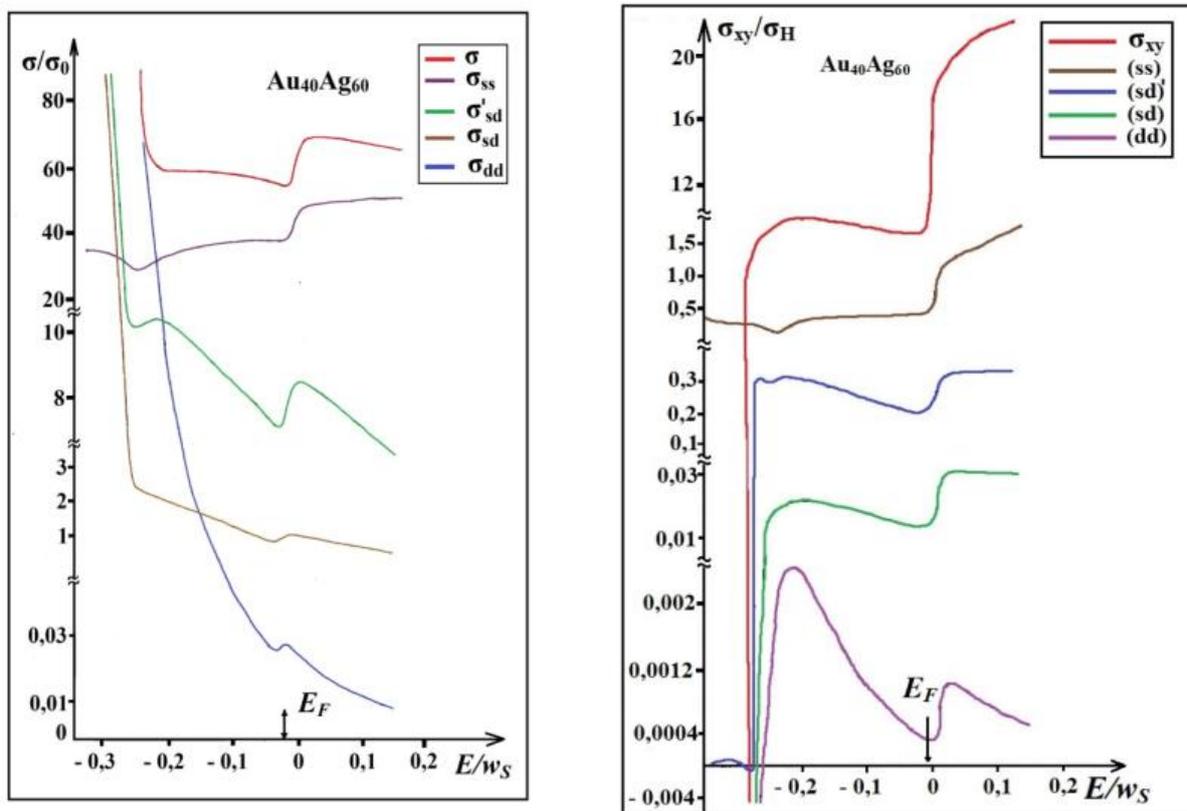
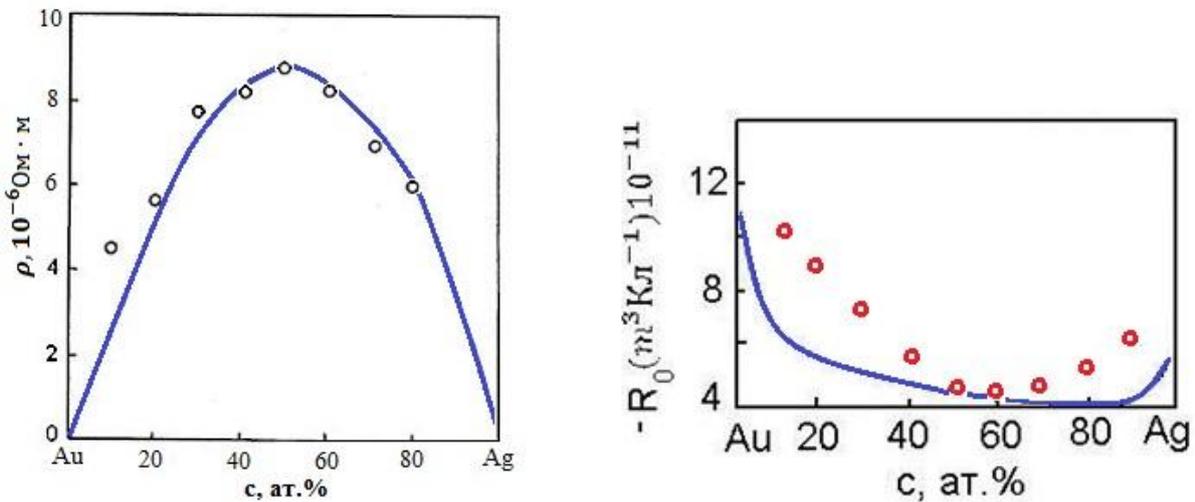


Рис. 2. Зависимость парциальных и полного электропроводности σ_{xx} и недиагональной электропроводности σ_{xy} сплава Au₄₀Ag₆₀ от энергии

$$\left(\text{где } \sigma_0 = \frac{4v_m^2 e^2 \hbar}{3\pi^2 \Omega}, \sigma_H = \frac{-2v_m^4 e^3 \hbar^2 B}{9\pi^3 c \Omega} \right).$$

На рис. 2-3 приведены результаты расчетов этой модели для сплавов Au_xAg_{1-x} парциальных вкладов в диагональную и недиагональную части

электропроводности в зависимости от уровня Ферми, а также концентрационные зависимости электросопротивления и коэффициента Холла. Из рис.2 следует, что вклад d -состояний резко увеличивается при смещении уровня Ферми в сторону d -пика и становится определяющим при положении ε_F в окрестности максимального значения $N(E)$. При любых положениях ε_F впервые в ПКП полученный в данной работе вклад $(\sigma_{sd})'$, связанный с межзонными матричными элементами скорости, больше чем гибридационный вклад σ_{sd} и имеет близкую с ним энергетическую зависимость. Эти вклады σ_{sd} и $(\sigma_{sd})'$ резко возрастают в том случае, если d -состояния не заполнены. Для системы сплавов Au-Ag уровень Ферми находится вне d -пика и, тем не менее, парциальные вклады в полную удельную электропроводность σ сильно зависят от положения уровня Ферми. Как показывает анализ, это связано со значительными изменениями $Re\Sigma_{aa}(E)$ в соответствующей области энергии.



**3-расм. Концентрационная зависимость электросопротивления ρ (левый) и коэффициента Холла R_0 (правый) сплавов $\text{Au}_c\text{Ag}_{1-c}$:
 \circ – расчет; — — эксперимент.**

Из рис.2 следует, что при уровне Ферми вне d -зоны все вклады в σ_{xy} отрицательны, причем вклад связанный с \mathbf{k} -зависимостью гибридационного потенциала, превышает σ_{sd} вклад. Вблизи вершины d -зоны σ_{dd} вклад становится положительным, а вклады σ_{sd} и $(\sigma_{sd})'$ имеют различную энергетическую зависимость. Сравнение расчетов концентрационной зависимостей электросопротивления $\rho = \sigma^{-1}$ и коэффициента Холла R_0 с экспериментальными данными показывают, что несмотря на модельный характер расчета получено удовлетворительное согласие с экспериментом, причем вклад связанный с межзонными матричными элементами скорости достигает в зависимости от состава 40-50%.

Для расчета явлений переноса в бинарных аморфных сплавах переходных металлов сначала в рамках ПКП для s - d модели с учетом недиагонального беспорядка рассчитывается одночастичная функция Грина эффективно-го сплава, в котором интеграл перескока принимает не одно или три, как в

кристаллическом сплаве, а непрерывный ряд значений, задаваемый гауссовой функцией распределения, соответствующей парной функции распределения атомов аморфного сплава. Определенная таким образом электронная структура аморфного сплава затем используется для расчета явлений переноса, исходя из формулы Кубо по методике, аналогично разработанной в ПКП для кристаллических сплавов.

Результаты расчета кривых плотности состояний $N(E)$ сплавов Cu-Zr показывают, что $N(E)$ расщепляется на два пика, причем пик, обусловленный Cu, сдвигается на большую величину относительно E_F и несколько сужается. Плотность состояний аморфных сплавов Cu-Zr на уровне Ферми определяется d -состояниями Zr и возрастает при увеличении содержания Zr в сплаве. Для аморфных сплавов Cu-Zr с существенной разницей ширин s - и d -зон учет недиагонального беспорядка приводит к энергетическому перераспределению d -электронов, при этом d -электроны Cu локализованы у дна валентной зоны, а электроны d -симметрии Zr – вблизи уровня Ферми (рис.4). Результаты расчетов парциальных вкладов в диагональную и недиагональную части электропроводности (рис.5) показывают, что вклад d -состояний резко увеличивается при смещении уровня Ферми в сторону d -пика Cu, что связано с высокими значениями плотности состояний при этих энергиях, и при любых положениях уровня Ферми вклад $(\sigma_{sd})'$ связанный с межзонными матричными элементами скорости электронов, одного порядка с гибридным вкладом σ_{sd} и имеет близкую с ним энергетическую зависимость.

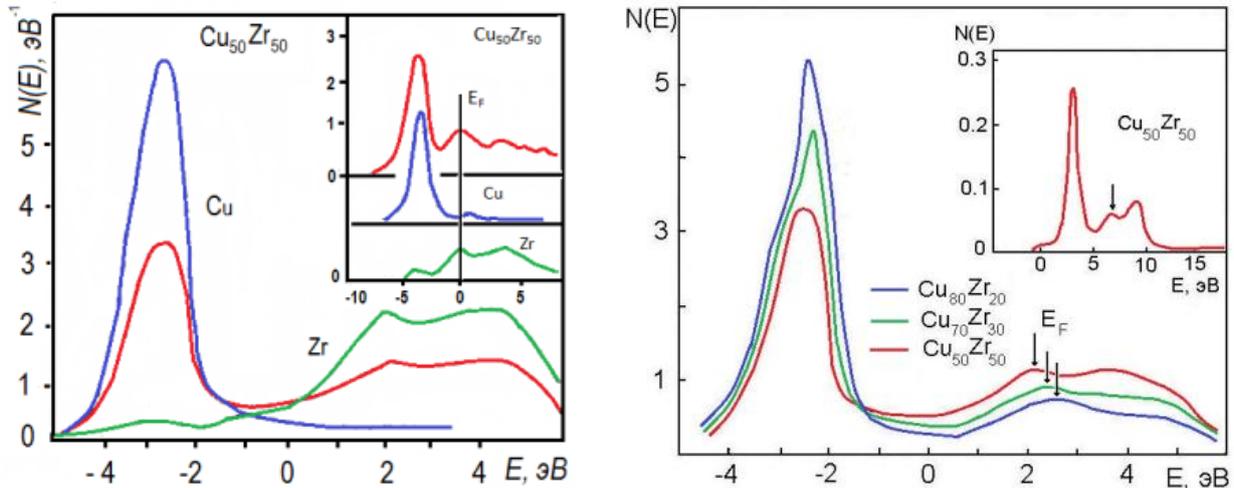
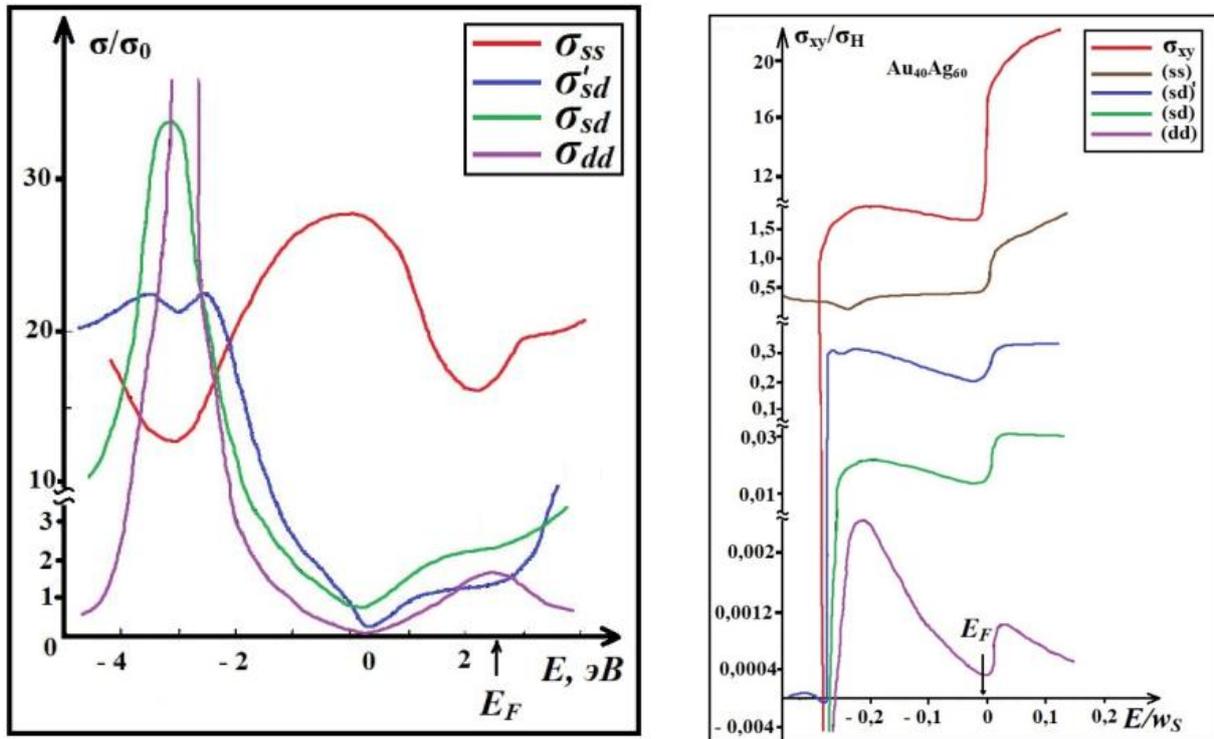


Рис. 4. Зависимость парциальных и полных плотностей состояний эквивалентного (левый) и для трех различных концентраций (правый) аморфного сплава Cu-Zr. Вертикальные линии указывают на положение уровня Ферми сплава. На вставке представлены результаты расчета методом ЛМТО плотности состояний сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$.

При истинном положении уровня Ферми (показано стрелкой) основным вкладом в результирующую электропроводность σ является вклад s -состояний (σ_{ss}), хотя вклад d -состояний (σ_{dd}) и гибридные вклады (σ_{sd} и $(\sigma_{sd})'$) не пренебрежимо малы. По-видимому, это связано с тем, что несмотря

на малый вклад в плотность состояний s -электронов, их затухание $\tau \sim \hbar/2\Delta$, в силу относительно слабого рассеяния, значительно меньше, чем для d -электронов. Прежде всего следует отметить весьма сложную зависимость от энергии парциальных вкладов в σ_{xy} , причем некоррелирующую с зависимостью от энергии энергии плотности состояний.

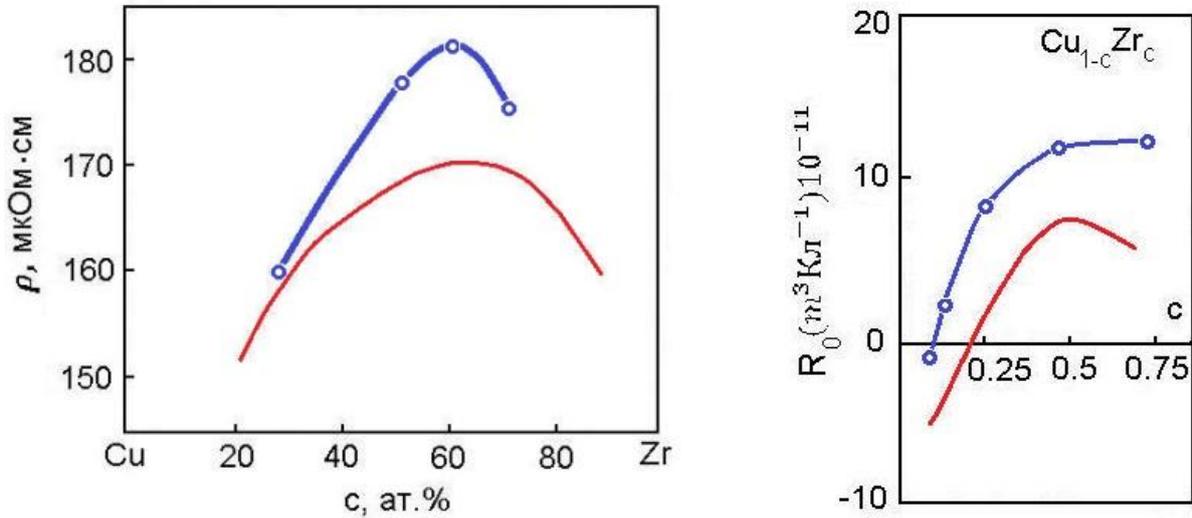


5-рasm. Зависимость парциальных вкладов в диагональную σ_{xx} (левый) и недиагональную σ_{xy} (правый) части тензора электропроводности от энергии для сплава $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$ (где $\sigma_0 = \frac{4v_m^2 e^2 \hbar}{3\pi^2 \Omega}$, $\sigma_H = \frac{-2v_m^4 e^3 \hbar^2 B}{9\pi^3 c \Omega}$).

Вклад σ_{xy}^{dd} сравнительно мал во всем диапазоне энергий, за исключением края d -пика Cu, и поэтому знак и величина R_0 определяется вкладом s -состояний σ_{xy}^{ss} и гибридными вкладами σ_{xy}^{sd} и $(\sigma_{xy}^{sd})'$. Смена знака σ_{xy} и R_0 при изменении положения уровня Ферми или при изменении состава сплава происходит в силу различной энергетической зависимости и противоположных знаков вклада, связанного с межзонными матричными элементами скорости - $(\sigma_{xy}^{sd})'$, и вкладов σ_{xy}^{ss} и σ_{xy}^{sd} . Это согласуется с концепцией Хоусона-Моргана об изменении знака R_0 в аморфных сплавах переходных металлов, за счет s - d гибридных эффектов.

Результаты расчета плотности состояний, электросопротивления и эффекта Холла аморфных сплавов $\text{Cu}_x\text{Zr}_{1-x}$, $\text{Cu}_x\text{Ti}_{1-x}$ в рамках принятой модели ПКП с учетом недиагонального беспорядка позволяют довольно удовлетворительно объяснить независимые экспериментальные данные, что подтверждает разумность используемых в расчетах предположений.

Далее в рамках многозонной модели ПКП предложена методика расчета электросопротивления и коэффициента Холла реальных сплавов на примере Pd-Ag при произвольной интенсивности рассеяния.



6-расм. Концентрационная зависимость электросопротивления ρ и коэффициента Холла R_0 аморфных сплавов $\text{Cu}_x\text{Zr}_{1-x}$:

— — расчет; \circ — эксперимент.

Для определения мнимой части Гринвской функции $\text{Im}G_k^i(\epsilon)$ и электронного спектра $\epsilon^i(k)$ сплава использовалась интерполяционная модель Ходжес-Эренрейх-Ланга с матрицей зонного гамильтониана вида

$$H_o = \begin{vmatrix} H_{ss} & H_{sd} \\ H_{ds} & H_{dd} \end{vmatrix}, \quad (23)$$

где H_{dd} и H_{ss} являются соответственно 5×5 - и 4×4 -субматрицами, описывающими вырожденные негибридизированные d -зоны в приближении сильной связи и негибридизированные s -зоны в приближении почти свободных электронов. Субматрицы H_{sd} и H_{ds} описывают эффекты гибридизации. Параметры интерполяции подобраны из условия совпадения вычисленных значений энергий компонент со значениями, рассчитанными из первых принципов. Диагонализацией матрицы (23) находим энергетический спектр для Pd и Ag в 165 опорных точках зоны Бриллюэна и с использованием тетраэдронного метода интегрирования производим расчет плотности состояний. Центры тяжести s - и d -полос компонент рассчитывались по формуле:

$$\epsilon_i^j = \frac{\int_0^\infty N_i^j(E) E dE}{\int_0^\infty N_i^j(E) dE}. \quad (24)$$

Методом ПКП используя рассчитанные значения $N_i^j(E)$ и ϵ_i^j компонент для каждой полосы сплава находились парциальные и полные плотности состояний, когерентный потенциал, функций Грина и закон дисперсии вблизи уровня Ферми. Затем численным методом находились компоненты скорости и эффективной массы.

Результаты расчетов приведены на рис.7. Сравнение этих кривых показывает удовлетворительное согласие результатов расчета плотности состоя-

ний предложенным вариантом ПКП с экспериментальными данными по фотоэмиссии. В целом полученная концентрационная зависимость сопротивления соответствует экспериментальным данным, а концентрационная зависимость коэффициента Холла хорошо согласуется в области богатой Ag. Имеющее место некоторое расхождение теории с экспериментом для R_0 в области богатой Pd, по видимому, связано с тем, что при расчете σ_{xx} и σ_{xy} рассматривались вклады в проводимость, обусловленные только Γ -центрированной областью поверхности Ферми, вклады от многосвязной дырочной поверхности Ферми, охватывающей точки X и W не учитывались в силу сложности численных расчетов.

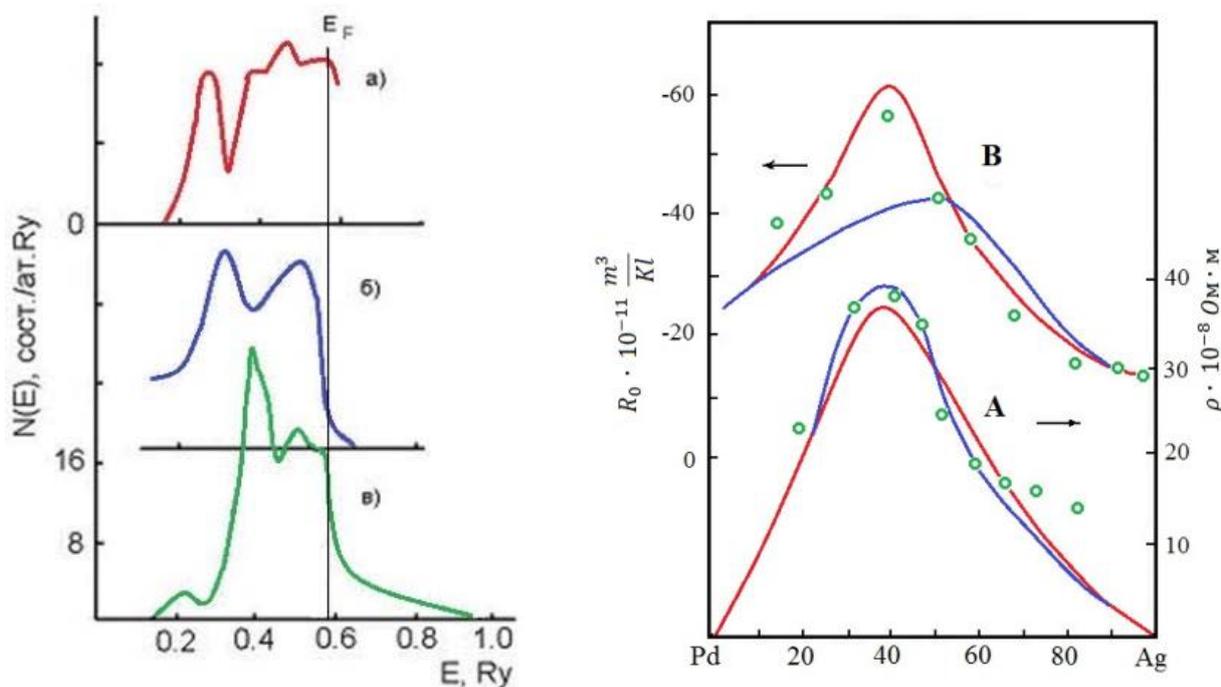


Рис. 7. Плотности состояний сплава $Pd_{80}Ag_{20}$ (левый), электросопротивление (А) и коэффициент Холла (Б) в сплавах Pd_xAg_{1-x} (правый):
 ○ – расчет ККР-ПКП ; — — — эксперимент ; — — — расчет

В четвертой главе диссертации «Лоренцовское магнитосопротивление неупорядоченных сплавов переходных металлов в ПКП» изложена теория классического (лоренцовского) магнитосопротивления неупорядоченных парамагнитных сплавов в однозонной модели ПКП. Используя формулу Кубо-Гринвуда для модели почти свободных электронов для поперечного магнитосопротивления сплавов с кубической решеткой получено следующее общее выражение:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{Кл} = \frac{\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(B=0)}{\rho_{xx}(B=0)} = \frac{1}{\sigma^{(0)}} \left[\sigma_{xx}^{(2)} + \frac{(\sigma_{xy}^{(1)})^2}{\sigma^{(0)}} \right] \quad (25)$$

где $\sigma^{(0)}$ – электропроводность в отсутствии магнитного поля, $\sigma_{xy}^{(1)}$ – холловская электропроводность и $\sigma_{xx}^{(2)}$ – квадратичная по полю поправка к электро-

проводности, которые в рамках рассматриваемой модели имеют следующий вид:

$$\sigma_{xy}^{(1)} = -(\omega\tau)\sigma^{(0)} \left[1 - d \cdot \frac{\Delta^2}{N^2} \right], \quad (26)$$

$$\sigma_{xx}^{(2)} = -(\omega\tau)^2\sigma^{(0)} \left[1 + a \frac{\Delta^2}{N^2} + b \frac{\Delta^4}{N^2} + c \frac{1}{N^2} \right], \quad (27)$$

где a , b , c и d - численные коэффициенты, Δ - мнимая часть когерентного потенциала, N - плотность состояний сплава, ω - ларморовская частота, τ - время релаксации. В случае слабого рассеяния ($\delta \ll 1$, а следовательно, $\Delta/\varepsilon_F \ll 1$) в низшем приближении по Δ из (25) следует, что поперечное магнетосопротивление в соответствии с классической теорией обращается в ноль. Пусть теперь рассеяние является слабым ($\delta \ll 1$), но учтем размытие поверхности Ферми, рассматривая первые не исчезающие поправки к (26) и (27) по Δ . Тогда учет следующего порядка по Δ приводит к отклонению от классических выражений и к нетривиальному результату: поперечное магнетосопротивление в этом случае не обращается в ноль. Этот результат можно интерпретировать следующим образом. Хорошо известно, что наличие двух типов носителей, образующих разными скоростями на уровне Ферми, приводит к конечному магнетосопротивлению, так как в этом случае поле Холла не может полностью компенсировать действие силы Лоренца. Размытие поверхности Ферми практически означает, что существует некий набор мало отличающихся скоростей электронов проводимости.

Пусть теперь рассеяние не является слабым, тогда следует пользоваться общими выражениями (27) и (26). И тогда

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \right) = (\omega\tau)^2 \left[(a + 2d)a \frac{\Delta^2}{N^2} + \left(\frac{b}{N^2} - \frac{d^2}{N^4} \right) \Delta^4 + \frac{c}{N^2} \right], \quad (28)$$

что при $\Delta \sim \varepsilon_F$ приводит уже в изотропном случае к величине порядка

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \right) \approx (\omega\tau)^2, \quad (29)$$

так как коэффициенты в квадратной скобке порядка 1.

При наличии анизотропии закона дисперсии уже в предельном случае слабого рассеяния $\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \right) \neq 0$. Причем анализ общих выражений (25-27) показывает, что $\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \right)$ порядка $(\omega\tau)^2$ и также численно увеличивается при увеличении интенсивности рассеяния. То есть нами не найдено существенных по порядку величины изменений величины $\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \right)$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведенных исследований по изучению электронной структуры и явлений переноса парамагнитных сплавов переходных металлов можно сделать следующие выводы:

1. Предложена обобщенная s - d модель для расчета явлений переноса в сплавах переходных металлов, в которой учитываются межзонные матричные элементы скорости v_{sd} и рассеяние в s -зоне.

2. В рамках обобщенной s - d модели получены общие выражения для электропроводности и коэффициента Холла.

3. Для модели с полуэллиптической формой плотности состояний при различном положении уровня Ферми в широком диапазоне концентраций и при различных значениях интенсивности рассеяния рассчитаны электрическое сопротивление, коэффициент Холла бинарных сплавов переходных металлов. Получено, что гибридизация и d -состояния дают существенный вклад в проводимость и в эффект Холла. Показано, что положительные значения коэффициента Холла обусловлены особенностями электронной структуры сплавов.

4. В рамках модельной и реалистической модели плотности состояний рассчитано сопротивление и коэффициент Холла кристаллических сплавов Au-Ag, Pd-Ag, Au-Pd и аморфных сплавов CuZr, CuTi. Получено удовлетворительные согласия с экспериментальными данными во всем диапазоне концентраций.

5. В рамках ПКП построена теория классического (лоренцовского) вклада в магнетосопротивление для однозонной модели сплава. Получено, что поперечное магнетосопротивление в случае изотропного законе дисперсии, если рассеяние носителей тока носит неборновский характер не обращается в ноль. При увеличении интенсивности рассеяния магнетосопротивление возрастает пропорционально размытию поверхности Ферми.

SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARD OF THE SCIENTIFIC DEGREE

PhD.03/30.12.2019.FM.02.04

SAMARKAND STATE UNIVERSITY

SAMARKAND STATE UNIVERSITY

IMAMNAZAROV DAVRON HAMRAYEVICH

**THE ELECTRONIC STRUCTURE AND TRANSPORT PHENOMENA IN
PARAMAGNETIC ALLOYS OF TRANSITION METALS**

01.04.05 – Physics of magnet phenomena

ABSTRACT

of dissertation of the doctor of philosophy (PhD) on the physical and mathematical sciences

Samarkand – 2022

The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) was registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number № B2019.4.PhD/FM448.

Dissertation has been prepared at the Samarkand State University.

The abstract of the dissertation is posted in three languages (uzbek, russian, english (resume)) on the website (www.samdu.uz) and the "Ziyonet" information and educational portal (www.ziyonet.uz).

Scientific supervisor: **Kuvandikov Oblokul Kuvandikovich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

Official opponents: **Eshpulatov Barot Eshpulatovich**
Doktor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Ibadov Rustam Mustafayevich
Doktor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Leading organization: **Bukhara State University**

Dissertation defense will be held on « 4 » 03 2022 at 13⁰⁰ at the meeting of Scientific Council number PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 at Samarkand State University. (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz. cabinet 63, ground floor, the department of Physics, Samarkand State University).

Dissertation is possible to review in Information Resource Centre at Samarkand State University (is registered № 23) (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40).

Abstract of dissertation sent out on « 16 » 02 2022 year
(Mailing report № 18 on « 15 » 02 2022 year).



M.Kh.Ashurov
Chairman of scientific council
on award of scientific degrees,
DSc in physics and mathematics, academician

R.M.Radjabov
Scientific secretary of scientific council
on award of scientific degrees,
CSc in physics and mathematics, docent

D.I.Semenov
Chairman of scientific seminar under scientific
council on award of scientific degrees,
DSc in physics and mathematics, docent

INTRODUCTION (abstract of the PhD dissertation)

The aim of the research. Theoretical study of the electrical resistivity and coefficient of normal Hall effect in the two-band s-d model of the coherent potential approximation (CPA) of crystalline and amorphous paramagnetic alloys of transition metals.

The objects of the research is crystalline and non-crystalline binary substitutional alloys of transition and noble metals.

Research objectives:

the derivation of a general expression for the electrical resistivity and the normal Hall effect coefficient in the modified s-d model coherent potential approximation of the Vedyayev-Brouers within into account the interband matrix elements of velocity and scattering in the s-zone;

research of concentration and temperature dependences of transport phenomena for both model and real density of states of alloy components;

theoretical research in the framework of the coherent potential approximation of the classical magnetoresistance of paramagnetic alloys during strong scattering.

The scientific novelty of the research is as follows:

for the first time in the framework of the proposed generalized s-d model of the single-site CPA, the normal Hall effect coefficient R_0 and specific electrical resistance ρ were calculated of the crystalline and non-crystalline paramagnetic transition metal alloys. New additional terms are obtained in the expressions ρ and R_0 related to interband matrix elements of velocity v_{sd} ;

it was shown that, under certain conditions, the contribution associated with hybridization is not small and can lead to a significant change in the sign of R_0 from negative to positive when the concentrations of one of the alloy components change;

it has been found that the effect of strong scattering and hybridization leads to deviations from Nordheim's law in the change of specific electrical resistance depending on the concentration;

it was found that the electrical resistance increases, decreases, and does not change depending on the location of the Fermi energy in the temperature-dependent change in specific electrical resistance as a result of the effect of strong scattering;

the theory of the classical magnetoresistance of disordered transition metal alloys was first constructed in the framework of the single-band model of the CPA and the Kubo formalism.

Implementation of research results. Based on the results obtained on the study of the electronic structure and kinetic properties of crystalline and amorphous alloys of transition metals in the paramagnetic state:

The results of studies on the effect of sd hybridization on the electronic structure and kinetic properties of amorphous paramagnetic alloys were used by Prof. B.R. Gelchinsky (Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg) during research under the RFBR project No.

15-03-04182 "Fundamental laws of the process gas-phase synthesis of metal nanoclusters, studied by methods of multiscale computer modeling ". Application of scientific results made it possible to explain the mechanisms of obtaining metal nanoclusters, and also made it possible to simulate their electronic structure;

The results of studies on magnetoresistance in the case of an isotropic dispersion law and with an increase in the intensity of electron scattering increases in proportion to the smearing of the Fermi surface were used in the implementation of the fundamental grant ITD-14-027 at SSU "The use of quantum point nanomaterials obtained by ion implantation in Solar energy". The results of the study make it possible to estimate the colossal magnetoresistance of quantum point nanomaterials obtained in this study. (Ministry of Higher and Secondary Specialized Education of the Republic of Uzbekistan, certificate dated October 30, 2020, No. 89-03-4305).

Approbation of the research results. Results of the research work have been discussed at 2 international and 5 republican scientific and practical conferences.

Publication of research results. In total, 18 scientific works were published on the topic of the research, including 11 scientific articles (4 republican and 7 foreign journals) were published in the list of scientific publications recommended for publication of the main scientific results of dissertations of the Higher Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan.

The structure and volume of the dissertation. The dissertation consists of introduction, four chapters, conclusion, two appendices and list of used literature. The volume of the dissertation is 131 pages, including 33 figures and 5 tables.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; I part)

1. Грановский А.Б., Имамназаров Д.Х., Халилов И.Х. Электросопротивление и эффект Холла неупорядоченных сплавов Au_xAg_{1-x} в s-d модели (приближение когерентного потенциала). - Физика металлов и металловедение (ФММ), Россия, 1991, №7. – С.25-31.Импакт-фактор: 0,977.

2. Granovsky A.B., Imamnazarov D.Kh., Khalilov I.Kh. Electrical resistivity and the Hall effect of disordered alloys in the coherent potential approximation. – Physics of Metals and Metallography. 1991, V72, №1. – P.24-31. Impact factor: 0,977.

3. Ведяев А.В., Грановский А.Б., Халилов И.Х., Имамназаров Д.Х., Ниналалов С.А., Гехтман М.М. Электросопротивление и эффект Холла аморфных сплавов Cu_xZr_{1-x} в s-d модели (приближение когерентного локатора). – Вестник МГУ, Сер.3, Физика-астрономия. 1991. Т.32. №5. – С.61-67. Импакт-фактор: 0,538.

4. Грановский А.Б., Халилов И.Х., Имамназаров Д.Х. Электросопротивление и эффект Холла в неупорядоченных бинарных сплавах замещения Pd_xAg_{1-x} . – Металлофизика (Украина). 1991, Т.13, №1. – С.99-102. Импакт-фактор: 0,320.

5. Ведяев А.В., Грановский А.Б., Имамназаров Д.Х., Халилов И.Х. Лоренцовское магнитосопротивление неупорядоченных сплавов в приближении когерентного потенциала. – Вестник МГУ, Сер.3, Физика-астрономия. 1992. Т.33, №6. – С.78-83. Импакт-фактор: 0,538.

6. Субханкулов И., Кувандыков О.К., Имамназаров Д.Х., Одылов Б. Особенности структуры, электрические, термоэлектрические и магнитные свойства некоторых сплавов металлов группы железа в жидком и аморфном состояниях. – В сб.: «Исследования по теоретической и экспериментальной физике». СамГУ, Самарканд, 1997. – С.160-166.

7. О.К.Кувандиков, Д.Х.Имамназаров. Kogerent potentsiallar metodi yordamida amorf holatdagi Cu_xTi_{1-x} qotishmalarda Xoll koeffitsentini hisoblash. – SamDU ilmiy axborotnomasi. 2020. №1. – B. 149-159.

8. D.H.Imamnazarov, A.B.Granovsky. Temperature Dependence of the Electrical Resistivity and Hall Effect of Disordered Au_xPd_{1-x} Alloys. – Moscow University Physics Bulletin. 2020. Vol.75. No.3, pp.230-236. DOI: 10.3103/S0027134920030108. Импакт-фактор: 0,538.

9. О.К.Кувандиков, Д.Х.Имамназаров, Ф.Б.Рузибоева. Kogerent potentsiallar metodi yordamida amorf holatdagi Cu_xTi_{1-x} qotishmalarda thermo-elektr yurituvchi kuch (EYuK) ni hisoblash. – SamDU ilmiy axborotnomasi. 2021. №1. – B. 142-147.

10. О.К.Кувандиков, И.Субханкулов, Д.Х.Имамназаров, Ш.А.Хомитов, Г.С.Бакаев. Изучение природы спиновых волн в аморфных ферромагнитных сплавах. – SamDU ilmiy axborotnomasi. 2021. №3. – В. 114-118.

11. O.K.Kuvandikov, I.Subkhankulov, V.U.Amonov, D.H.Imamnazarov. Physical Properties of Amorphous Alloys. Journal «Metallophysics and Advanced Technologies» (Ukraine). - 2021, vol.43, No.12, pp.1601-1609. DOI: 10.15407/mfint.43.12.1601

II бўлим (II часть; II part)

12. Кувандиков О.К., Хамраев Н.С., Усанов Ш.Х., Имамназаров Д.Х. Магнитные свойства и явление переноса в ферромагнитных сплавах сплавах на основе железа. – Тезисы докладов XII Всесоюзной школы-семинара «Новые магнитные материалы микроэлектроники». Россия. Новгород. 1990. Ч.2. С.68.

13. Кувандиков О.К., Субханкулов И.Б., Турдибеков И., Хакимов Т., Адылов Б., Усанов Ш.Х., Имамназаров Д.Х., Махатов А. Влияние радиационного излучения на физические свойства металлических стекол на основе железа. – Тезисы докладов I региональной конференции республик Средней Азии и Казахстана по радиационной физике твердого тела. Самарканд. 1991. 21-23 мая. Ч.3. С.326-327.

14. Грановский А.Б., Имамназаров Д.Х., Халилов И.Х. Сопротивление, эффект Холла и магнитосопротивление кристаллических и аморфных сплавов переходных металлов. – Тез.докл. XIX Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений. Ташкент. 24-27 сентябрь 1991 г. Ч.2. С.56.

15. Кувандиков О.К., Имамназаров Д.Х., Субханкулов И.Б. Влияние гибридизации на нормальный эффект Холла парамагнитных сплавов переходных металлов. – Тезисы докладов Международной конференции «Проблемы теоретической физики и физики твердого тела». Бухара. 1997. С.113-114.

16. D.X.Imamnazarov, O.I.Boliyev. Kogerent potentsial metodi asosida amorf Cu_xTi_{1-x} qotishmalarda Xoll koefficientini hisoblash. - «Fizikaning hozirgi zamon ta'limidagi o'rni mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari. – Samarqand. 2019-yil 13-14 dekabr. – В. 321-324.

17. D.X.Imamnazarov, F.B.Ruziboyeva. Kogerent potentsial metodi asosida amorf Cu_xTi_{1-x} qotishmalarda thermo-E.Yu.K ni hisoblash. - «Fizikaning hozirgi zamon ta'limidagi o'rni» mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari. – Samarqand. 2019-yil 13-14 dekabr. – В. 324-327.

18. О.К.Кувандиков, Д.Х.Имамназаров, Р.М.Ражабов. Порядок-беспорядок в бинарных сплавах переходных металлов // Zamonaviy ta'limda matematika, fizika va raqamli texnologiyalarning dolzarb muammolari va yutuqlari. Toshkent viloyati Chirchiq davlat pedagogika institute // VOLUME 2 | CSPI CONFERENCE 3 | 2021. В.265-266.

Автореферат «СамДУ илмий ахборотномаси» таҳририятида
таҳрирдан ўтказилди ва унинг ўзбек, рус ва инглиз тили
матнлари ўзаро мос келади (08.02.2022).

2022 йил 9 февралда босишга рухсат этилди:
Офсет босма қоғози. Қоғоз бичими 60×84_{1/16}.
“Times” гарнитураси. Офсет босма усули.
Ҳисоб-нашриёт т.: 3,0. Шартли б.т. 2,3.
Адади 100 нусха. Буюртма № 10/02.

СамДЧТИ нашр-матбаа марказида чоп этилди.
Манзил: Самарқанд ш, Бўстонсарой кўчаси, 93.