ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 4 (1997) с. 599–604

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 4 (1997) p. 599–604

ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН–ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ЕЛЕКТРОННІ ЯВИЩА ПЕРЕНОСУ В АМОРФНИХ МЕТАЛАХ

В. Швець
Одеська державна академія холоду, Україна, UA–270100, Одеса, вул. Петра Великого, 1/3
(Отримано 15 жовтня 1996)

У наближенні сильного зв'язку в межах теорії лінійної реакції Кубо обчислено коефіцієнти електропровідности, електронного внеску в теплопровідність та термо-е.р.с. аморфних металів. Для останніх двох кінетичних коефіцієнтів такі розрахунки виконано вперше. На всіх етапах обчислень послідовно враховано динаміку йонів. У результаті в остаточні вирази для кінетичних коефіцієнтів увійшла нова структурна функція йонної підсистеми. З'ясовано її зв'язок з двочастинковим структурним фактором йонів. У цьому випадку внесок динаміки йонів враховано в рамках моделі невзаємодіючих гармонійних осциляторів. В області низьких температур, характерних для аморфних металів, досліджено температурну залежність електроопору та числа Лоренца. В першому випадку отримано характерне для аморфних металів з великим електроопором зменшення електроопору в області низьких температур з підвищенням температури та вихід його на насичення при високих температурах, у другому — характерне для кристалічних металів суттєве порушення закону Відемана–Франца при низьких температурах, зумовлене електрон–фононною взаємодією. Температурна залежність термо-е.р.с., розрахованої в наближенні сильного зв'язку, виявилась якісно такою, як і в наближенні слабкого зв'язку.
Ключові слова: електропровідність, теплопровідність, термо-е.р.с., аморфні метали.

PACS number(s): 72.10.Di, 72.15.Cz

I. ВСТУП

Усі невпорядковані метали можна розділити на дві групи [1]. У металах першої групи, з порівняно низьким опором, опір з підвищенням температури збільшується. Для металів другої групи, з високим опором, спостерігається зворотне явище. Характерним опором, що розділяє ці дві групи, є опір 150–200 мкОм · см. У першому випадку для опису електронних явищ перенесення прийнятним є наближення майже вільних електронів. У другому випадку адекватним ситуації є наближення майже зв'язаних електронів. Сьогодні можна констатувати, що практично всі аспекти наближення майже вільних електронів стосовно електронних явищ перенесення у невпорядкованих металах досліджені досить повно (див., наприклад, [2, 3]). Водночас наближення майже зв'язаних електронів використовували небагато науковців лише для обчислення коефіцієнта електропровідности невпорядкованих металів [3–6]. І лише в останній з цих праць враховано вплив електрон–фононної взаємодії на електропровідність аморфних металів. Зауважимо, що врахування впливу електрон–фононної взаємодії на електронні явища перенесення у невпорядкованих металах з високим електроопором є однією з невирішених проблем.

Наша мета — отримати вираз для електронного внеску у теплопровідність та термо-е.р.с. аморфних металів з високим електроопором. У цьому випадку буде враховано і динаміку йонної підсистеми, а також обчислено температурні залежності електро- та теплопровідности в області низьких температур.

II. ГАМІЛЬТОНІЯН

Як гамільтоніян електронної підсистеми оберемо такий:

$$H_e = \sum_n \varepsilon_n b_n^+ b_n + \sum_{n,n'} J_{n,n'} b_n^+ b_{n'}, \qquad (1)$$

де b_n^+ та b_n — оператори породження та знищення електронів у n-му стані (n — номер йона або набір квантових чисел, що характеризують стан електрона на йоні); ε_n — енергія електрона; $J_{n,n'}$ — матричний елемент переходу електрона між станами n та n'.

Для обчислення коефіцієнтів електропровідности та електронного внеску у теплопровідність і термо-е.р.с. нам потрібні також оператори електричного струму та потоку тепла. Під час обчислення оператора електричного струму як початкову точку звичайно використовують оператор дипольного моменту електронів провідности. Завдяки підходу за допомогою модельного гамільтоніяна (1) для оператора електричного струму $\mathbf{I}_\sigma$ можна отримати вираз

$$\mathbf{I}_\sigma = \frac{ie}{h} \sum_{n,n'} J_{n,n'} (\mathbf{r}_{nn} - \mathbf{r}_{n'n'}) b_n^+ b_{n'}, \qquad (2)$$

де e — заряд електрона; h — стала Планка; $\mathbf{r}_{nn}$ — матричний елемент радіус–вектора електрона на n-му йоні у відповідному квантовому стані. Для процесу перенесення тепла оператор, аналогічний до оператора дипольного моменту, не має чітко визначеного фізичного змісту і його моделювання утруднене. В цьому випадку доцільно безпосередньо моделювати оператор потоку тепла I_k. Логічним для цього є виконання таких умов: оператор потоку тепла повинен мати структуру, збіжну зі структурою оператора електричного струму та бути лінійним відносно теплової енергії електрона $\varepsilon_n - \mu$, де μ — хемічний потенціял електронного газу. Найбільш простим виразом, що задовольняє ці умови, є

$$\mathbf{I}_k = \frac{i}{2h}\sum_{n,n'} J_{nn'}[\varepsilon_n + \varepsilon_{n'} - 2\mu] \times(\mathbf{r}_{nn} - \mathbf{r}_{n'n'})b_n^+ b_{n'}. \quad (3)$$

Якщо матричний елемент оператора переходу розкласти в ряд Фур'є

$$J_{nn'} = V^{-1}\sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k})\exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})], \quad (4)$$

де $\mathbf{R}_n$ — радіус–вектор n-го йона, V — об'єм системи, то вираз для операторів електричного струму та потоку тепла можна записати і в іншому вигляді:

$$\mathbf{I}_\sigma = \frac{ie}{hV}\sum_{n,n',\mathbf{k}} \frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}\exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})]b_n^+ b_{n'}, \quad (5)$$

$$\mathbf{I}_k = \frac{i}{2hV}\sum_{n,n',\mathbf{k}} \frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}[(\varepsilon_n - \mu) + (\varepsilon_{n'} - \mu)] \times\exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})]b_n^+ b_{n'}. \quad (6)$$

У цьому випадку для спрощення ми прийняли, що $\mathbf{r}_{nn} - \mathbf{r}_{n'n'} \approx \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$. Остання наближена рівність стає точною, якщо для електронів провідности на кожному вузлі враховувати лише по одному з можливих енергетичних станів. Для більшости металів, якщо нема зовнішнього високочастотного електричного поля, таке наближення є добрим.

III. КІНЕТИЧНІ КОЕФІЦІЄНТИ

Для обчислення коефіцієнта електропровідности σ досліджуваних металів скористаємось теорією лінійної реакції Кубо, відповідно до якої

$$\sigma = \frac{1}{3Vk_BT}Im\langle\langle \mathbf{I}_\sigma(t)\mathbf{I}_\sigma(0)\rangle\rangle_0, \quad (7)$$

де подвійні кутові дужки позначають двочастинкову загаяну функцію Ґріна, а нижній індекс "0" — нульову Фур'є–компоненту цієї функції; T — абсолютна температура.

Якщо знехтувати членами, що мають порядок величини $(k_BT/E_F)^2$, де E_F — енергія Фермі, то для електронного внеску в коефіцієнт теплопровідности κ і термо-е.р.с. Q отримаємо такі вирази:

$$\kappa = \frac{1}{3Vk_BT^2}Im\langle\langle \mathbf{I}_\kappa(t)\mathbf{I}_\kappa(0)\rangle\rangle_0, \quad (8)$$

$$Q = -\frac{1}{3Vk_BT^2\sigma}Im\langle\langle \mathbf{I}_\sigma(t)\mathbf{I}_\kappa(0)\rangle\rangle_0. \quad (9)$$

Для обчислення всіх зазначених вище кінетичних коефіцієнтів у найнижчому порядку теорії збурень за матричним елементом переходу $J_{nn'}$ достатньо безпосередньо підставити у відповідні співвідношення вирази для операторів електричного струму та потоку тепла. В цьому випадку усереднення за електронними та йонними ступенями вільности у відповідних виразах для кінетичних коефіцієнтів можна виконати незалежно.

Усереднення за йонними ступенями вільности приводить до появи такої структурної функції йонної підсистеми:

$$S(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = N_i^{-1}\sum_{n,n'}\langle\exp\{i\mathbf{k}[\mathbf{R}_n(t) - \mathbf{R}_{n'}(t)]\} \times\exp\{i\mathbf{k}[\mathbf{R}_n(0) - \mathbf{R}_{n'}(0)]\}\rangle_\omega^i, \quad (10)$$

де N_i — кількість йонів у системі, підсумовування виконують тільки за положеннями йонів, верхній індекс i означає усереднення тільки за різними конфіґураціями йонної підсистеми; нижній індекс ω — відповідне Фур'є–зображення.

Усереднення за електронними ступенями вільности потребує обчислення в нульовому наближенні теорії збурень за матричним елементом переходу найпростішої двочастинкової загаяної функції Ґріна. Вираз для уявної частини останньої має вигляд

$$Im\langle\langle b_n^+(t)b_{n'}(t)b_m^+(0)b_{m'}(0)\rangle\rangle_\omega^e \quad (11)$$
$$= -\pi\delta_{nm'}\delta_{n'm}\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_{n'} + h\omega)\frac{n(\varepsilon_n) - n(\varepsilon_n + h\omega)}{1 - \exp(-h\omega/k_BT)},$$

де $n(\varepsilon)$ — функція розподілу Фермі–Дірака; $\delta(\omega)$ — дельта–функція Дірака; δ_{nm} — символ Кронекера; верхній індекс e означає, що усереднення виконується лише за електронними координатами.

Кінцеві вирази для коефіцієнта електропровідности, електронного внеску в теплопровідність та термо-е.р.с. у розглянутому наближенні будуть такими:

$$\sigma = \frac{e^2 N_i}{6V^3h^3} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \frac{dJ(\mathbf{k}')}{d\mathbf{k}'} G^2(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{h\omega/k_BT}{\exp(h\omega/k_BT)-1} S(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega); \tag{12}$$

$$\kappa = \frac{2\pi^2 N_i k_B^2 T}{9V^3h^3} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \frac{dJ(\mathbf{k}')}{d\mathbf{k}'} G^2(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{h\omega/k_BT}{\exp(h\omega/k_BT)-1} S(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)(1+3h^2\omega^2/\pi^2k_B^2T^2); \tag{13}$$

$$Q = \frac{e\pi^2 N_i k_B^2 T}{9V^3h^3\sigma} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \frac{dJ(\mathbf{k}')}{d\mathbf{k}'} G^2(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{h\omega/k_BT}{\exp(h\omega/k_BT)-1} S(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)$$

$$\times[G(E_F)G'(E_F) - 3h\omega G^2(E_F)/4\pi^2k_B^2T^2], \tag{14}$$

де $G(\varepsilon)$ — густина локалізованих станів. Для трьох останніх виразів ми врахували той факт, що характерні частоти йонної підсистеми набагато менші від характерних частот електронної підсистеми, тому в розкладенні функції $n(\varepsilon + h\omega)$ в ряд за степенями частоти $h\omega$ ми обмежилися першими двома членами розкладу. Крім того, враховано виродженість електронного газу, що дало змогу замінити похідні функції $n(\varepsilon)$ за енергією на дельта–функцію Дірака. І, нарешті, від підсумовування за локалізованими енергетичними станами електронів ми перейшли до інтеґрування за цими станами з ваговою функцією, роль якої відіграє густина станів електронів провідности $G(\omega)$.

Зазначимо, що вирази для електронного внеску у теплопровідність та термо-е.р.с. у наближенні сильного зв'язку отримано вперше. Для коефіцієнта електропровідности новою є форма його зображення, що дає змогу достатньо легко врахувати динаміку йонної підсистеми.

IV. СТРУКТУРНА ФУНКЦІЯ

Структурну функцію (10) ми вже розглядали в [6]. Її обчислено для системи гармонійних осциляторів з невзаємодіючими ступенями вільности. Тому наведемо лише остаточний результат:

$$S(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = 2\pi[S(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - 1 + N_i\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}]\left\{\delta(\omega)\left\{1 - 2\frac{\varepsilon_k+\varepsilon_{k'}}{h\omega_0}\frac{m}{M}[n(\omega)+1/2]\right\}\right.$$

$$\left. + \frac{h\mathbf{k}\mathbf{k}'}{M\omega_0}\{n(\omega)\delta(\omega+\omega_0) + [1+n(\omega)]\delta(\omega-\omega_0)\}\right\}, \tag{15}$$

де

$$\varepsilon_k = h^2k^2/2m; \tag{16}$$

$$S(k) = N_i^{-1}\sum_{n,n'} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n^0 - \mathbf{R}_{n'}^0)] + 1 - N_i\delta_{\mathbf{k}0} \tag{17}$$

— статичний структурний фактор йонної підсистеми; $n(\omega)$ — функція розподілу осциляторів; ω_0 — частота гармонійного осцилятора; M — маса йона; $\mathbf{R}_n^0$ — радіус–вектор рівноважного положення n-го йона.

V. ОБГОВОРЕННЯ

Доданок $S(k)-1$ у виразі для структурної функції описує роль ближнього порядку в електронних явищах перенесення в металах. Температурні залежності розглянутих кінетичних коефіцієнтів можна легко проаналізувати принаймні якісно, роблячи припущення про повну структурну невпорядкованість аморфних металів, тобто у випадку, коли $S(k) = 1$ У результаті

$$\sigma = \frac{\pi e^2 N_i^2}{V^3 h^3} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}\right]^2 G^2(E_F) \left\{1 - 2\frac{\varepsilon_k}{h\omega_0}\frac{m}{M}\left\{\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(h\omega_0/k_B T) - 1}\right] + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{h\omega_0/k_B T}{[\exp(h\omega_0/k_B T) - 1][\exp(-h\omega_0/k_B T) - 1]}\right\}\right\}; \tag{18}$$

$$\kappa = \frac{4\pi N_i^2 k_B^2 T}{3V^3 h^3} \sum \mathbf{k} \left[\frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}\right]^2 G^2(E_F) \left\{1 - 2\frac{\varepsilon_k}{h\omega_0}\frac{m}{M}\left\{\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(h\omega_0/k_B T) - 1}\right] + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{h\omega_0(1 + 3h^2\omega_0^2/\pi^2 k_B^2 T)/k_B T}{[\exp(h\omega_0/k_B T) - 1][\exp(-h\omega_0/k_B T) - 1]}\right\}\right\}; \tag{19}$$

$$Q = -\frac{2\pi^2 k_B^2 T}{3|e|}\frac{G'(E_F)}{G(E_F)}. \tag{20}$$

Отриманий нами в наближенні сильного зв'язку вираз для термо-е.р.с. з точністю до сталого множника і сталого доданка збігається з виразом для термо-е.р.с., отриманим у наближенні майже вільних електронів у межах моделі Мота [3]. Останнє достатньо добре описує температурну залежність термо-е.р.с. аморфних металів як з порівняно низьким, так і з високим електроопором [3, 8]. Ключовим елементом для розуміння обговорюваної температурної залежности є поведінка похідної густини станів за енергію.

Отримані нами результати дають змогу зробити надзвичайно важливий висновок про слабку чутливість термо-е.р.с. до інтенсивности взаємодії йонної та електронної підсистем аморфного металу. Механізм такої чутливости у нашому випадку пов'язаний з відкинутим у випадку якісного розгляду доданком $S(k) - 1$, зумовленим, як зазначено вище, роллю ближнього порядку у формуванні кінетичних властивостей невпорядкованих металів.

Для процесу електропровідности все зовсім поіншому. В області високих температур коефіцієнт електропровідности досягає максимального значення, характерного для рідких металів,

$$\sigma = \frac{\pi e^2 N_i^2}{V^3 h^3} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}\right]^2 G^2(E_F). \tag{21}$$

Останній вираз збігається з виразом, традиційним для коефіцієнта електропровідности рідких металів у наближенні сильного зв'язку [3], тільки записаний в іншому вигляді.

Подібний вигляд у цій області температур має вираз і для електронного внеску в коефіцієнт теплопровідности:

$$\kappa = \frac{4\pi N_i^2 k_B^2 T}{3V^3 h^3} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}\right]^2 G^2(E_F). \tag{22}$$

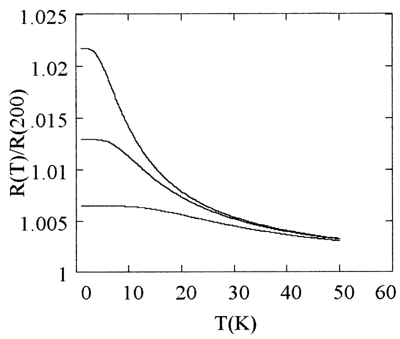

Рис. 1. Температурна залежність електроопору аморфних металів: 1 — $\omega_0 = 0.1 \cdot 10^{13}$; 2 — $\omega_0 = 0.3 \cdot 10^{13}$; 3 — $\omega_0 = 0.5 \cdot 10^{13}$.

Отже, закон Відемана–Франца в межах нашого підходу строго виконується, що є добре відомим експериментальним фактом.

В області низьких температур коефіцієнт електропровідности збільшується з температурою за законом

$$\sigma = \frac{\pi e^2 N_i^2}{V^3 h^3} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}\right]^2 G^2(E_F)^*,$$

$$\left\{1 - 2\frac{\varepsilon_k}{h\omega_0}\frac{m}{M}[1 - 2h\omega_0 \exp(-h\omega_0/k_B T)/k_B T]\right\}, \tag{23}$$

що добре узгоджується з експериментальними даними [8–10]. Така температурна поведінка коефіцієнта електропровідности у випадку сильно зв'язаних електронів провідности кардинально відрізняє його поведінку від випадку майже вільних електронів [1–3, 12, 13]. Отже, саме електропровідність є властивістю, критичною до інтенсивности електрон–йонної взаємодії. На рис. 1 показано результати числового розрахунку типової в нашому підході температурної залежности електроопору чистих аморфних металів в області низьких температур у випадку досить загальних уявлень про специфіку металів ($E_F = 0.5$ ат. од, відносна атомна маса дорівнює 50). Результати обчислень, виконаних для трьох різних частот коливань йонів, виявилися досить чутливими до значень цих частот. Оскільки обчислення частоти коливань йонів є окремим і досить складним завданням, то в нашому випадку частота відіграє фактично роль підгінного параметра.

Дещо інший характер в області низьких температур має температурна залежність електронного внеску в теплопровідність:

$$\kappa = \frac{4\pi N_i^2 k_B^2 T}{3V^3 h^3} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{dJ(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}\right]^2 G^2(E_F)^*, \tag{24}$$

$$\left\{1 - 2\frac{\varepsilon_k}{h\omega_0}\frac{m}{M}[1 - 6h^3\omega_0^3 \exp(-h\omega_0/k_BT)/\pi^2 k_B^3 T^3]\right\}.$$

Така поведінка електронного внеску в коефіцієнт теплопровідности дещо гірше узгоджується з експериментальними даними для аморфних металів [14, 15]. Вона не пояснює, наприклад, появи “плато” в температурній залежності теплопровідности в області низьких температур, хоча загальну тенденцію зміни теплопровідности в більш широкому діяпазоні температур, що включає “плато”, описує задовільно. Причиною цього, на нашу думку, є дещо спрощений підхід до обчислення структурної функції йонної підсистеми аморфних металів. Принциповим для використаної моделі є факт порушення закону Відемена–Франца для аморфних металів в області низьких температур, що зумовлене різною роллю електрон–фононної взаємодії в процесі електро- та теплопровідности. Результати відповідних числових розрахунків зображені на рис. 2.

На нашу думку, важливим є також те, що коефіцієнт електропровідности, обчислений у наближенні майже зв'язаних електронів, збільшується з підвищенням температури за законом, відмінним від степеневого. Це дає змогу запропонувати нове пояснення мінімуму електроопору, що простежується в області низьких температур практично у всіх аморфних металах. Як відомо [3, 12, 13], коефіцієнт електропровідности, обчислений в рамках моделі майже вільних електронів в області низьких температур, зменшується з підвищенням температури за степеневим законом, найчастіше за квадратичним. Обговорюваний мінімум електроопору можна пояснити, уявивши одночасну наявність у типовому аморфному металі двох підсистем електронів провідности — сильно та слабко зв'язаних з йонною підсистемою металу.

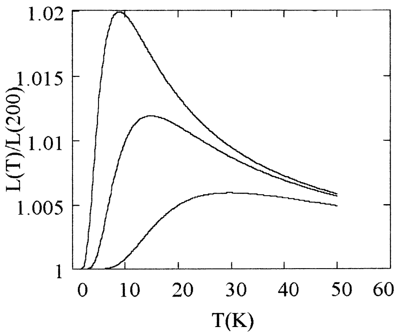

Рис. 2. Температурна залежність числа Лоренца аморфних металів: 1 — $\omega_0 = 0.1 \cdot 10^{13}$; 2 — $\omega_0 = 0.3 \cdot 10^{13}$; 3 — $\omega_0 = 0.5 \cdot 10^{13}$.

[1] *Аморфные металлические сплавы* Под ред. Ф. Е. Люборского (Мир, Москва, 1987).
[2] G. Busch, H. -Y. Güntherodt, Solid State Phys. **29**, 235 (1974).
[3] M. A. Howson, B. L. Gallagher, Phys. Rev. **170**, 265 (1988).
[4] M. Itoh, M. J. Watabe, J. Phys. F. **8**, 1725 (1978).
[5] A. Bosch, K. H. Bennemann, J. Phys. F. **5**, 1333 (1975).
[6] В. Т. Швец, Физ. низк. темп. **20**, 989 (1994).
[7] H.Böttger, V. V. Bryksin, Phys. Status Solidi **9**, 76 (1976).
[8] Chr. Lauinger, J. Feld, H. Rummelspacher, P. Haussler, Mat. Sci. Eng. A **181**/A **182**, 916 (1994).
[9] G. Fritach at all, Z. Phys. Chem. (Neue Folge) **157**, 647 (1988).
[10] M. J. Ising, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 3848 (1985).
[11] H. Fujimore at all, Mat. Sci. Eng. A **181**/A **182**, 897 (1994).
[12] V. T. Shvets, A. P. Fedtchuk, Physica Scripta **52**, 722 (1995).
[13] В. Т. Швец, Физ. твёрд. тела **37**, 2550 (1995).
[14] J. E. Graebner, B. Golding, L. C. Allen, Phys. Rev. B **34**, 5696 (1986).
[15] J. J. Freeman, A. C. Fnderson, Phys. Rev. B **34**, 5684 (1986).

INFLUENCE OF THE ELECTRON–PHONON INTERACTION ON THE ELECTRONIC TRANSPORT PHENOMENA IN AMORPHOUS METALS

V. T. Shvets
Odesa State Academy of Refrigeration
1/3 Dvorians'ka Str., UA–270100, Odesa, Ukraine

Electroconductivity, electron contribution to the flow conductivity coefficient and thermopower of disordered transition metals with high electroresistivity are calculated in the framework of Kubo theory and two time retarded Green functions method. A strong–coupling approximation was obtained. The electron contribution to the flow conductivity and thermopower was taken into account in the dynamics of the ionic subsystem. A theory of the new structural function that describes the space configuration of the ionic subsystem of metals was suggested, its link with a two-particle structural factor having been ascertained. This structural function was calculated within a wide temperature region on the basis of the idea of a nonlinked harmonic oscillator (Einstein's model). The temperature dependence of the coefficients of disordered metals has been researched.