

УДК 539.2 : 530.145

© 1992

## ВЛИЯНИЕ УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ СПЛАВА

*П. В. Петренко, В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, Н. П. Кулиш*

Методом когерентного потенциала, основанным на кластерном разложении для  $T$ -матрицы рассеяния, в пренебрежении вкладами от кластеров из трех и более атомов получены выражения для плотности электронных состояний и электропроводности сплавов. Исследовано влияние ближнего и дальнего упорядочения на электронный энергетический спектр и электропроводность сплавов.

Показано, что поведение электропроводности сплава при упорядочении существенно зависит от положения уровня Ферми по отношению к щели в энергетическом спектре электронов, возникающей при установлении дальнего порядка.

Существенные успехи, достигнутые в последнее время в теоретическом исследовании разнообразных свойств сплавов, в значительной мере обусловлены применением приближения когерентного потенциала [1]. Приближение когерентного потенциала (ПКП) является лучшим одноузельным приближением при расчете физических свойств сплава. Учет многочастичных межатомных корреляций в процессе многократного рассеяния электронов в сплаве требует выхода за рамки одноузельного приближения [2-10].

Эти обобщения ПКП позволяют при объяснении свойств сплава учесть и влияние локальных корреляций в расположении атомов, т. е. ближнего порядка (БП) на его характеристики. Многие существующие теоретические представления о БП в сплаве основываются на предположении о борновском характере рассеяния электронов проводимости [11] и поэтому неприменимы к описанию, например, сплавов благородных и переходных металлов. Многоузельные обобщения ПКП свободны от указанного недостатка и применимы к описанию сплавов с произвольной величиной «примесного» рассеяния.

В работе [12] методом когерентного потенциала [8], основанным на разложении по малому параметру  $R_0^{-3}$  ( $R_0$  — длина затухания интеграла перескока электрона в единицах постоянной решетки), исследовано влияние БП на энергетический спектр и электропроводность сплава при произвольной величине отношения потенциала «примесного» рассеяния к ширине зоны проводимости. Показано, что влияние БП на электропроводность сплава обусловлено не только изменением затухания электронных состояний при установлении корреляции в расположении атомов, но и изменением энергетического спектра. Последний эффект имеет место только при неборновском характере рассеяния электронов и, как показано в работе [12], становится существенным в сплавах, где уровень Ферми лежит вблизи точек окончания спектра.

Однако в ряде работ [9, 10, 13, 14] показано, что при ближнем упорядочении происходит изменение энергетического спектра не только на краю зоны, но и в середине. При этом на кривой энергетической зависимости плотности электронных состояний образуется характерный провал. Величина провала растет с увеличением степени ближнего порядка, что

представляет собой тенденцию к расщеплению энергетической зоны при установлении дальнего порядка [9, 11, 15].

В связи с этим представляется интересным исследование влияния ближнего и дальнего упорядочения на электропроводность сплавов для случая достаточного сильного рассеяния электронов в зависимости от того, попадает ли уровень Ферми в область указанного провала или находится вне его.

При этом следует иметь в виду, что сделанные в работе [12] выводы относительно влияния БП на электропроводность сплава не учитывают указанную выше перестройку спектра в центре зоны при наличии БП и основаны на методе работы [8], применимость которого, естественно, ограничена требованием большого  $R_0^3$ .

В работе [15] была исследована электропроводность сплавов при дальнем упорядочении в приближении когерентного потенциала. Однако случай, когда уровень Ферми попадает в область провала в спектре электронов, образующегося при упорядочении, не исследовался.

В данной работе проведено исследование влияния ближнего и дальнего упорядочения на электропроводность сплава с помощью метода [9, 10], основанного на кластерном переразложении бесконечного ряда для  $T$ -матрицы рассеяния электрона, члены которого достаточно быстро убывают с увеличением числа частиц в кластере по некоторому малому параметру  $\gamma$ . При этом межатомные корреляции могут учитываться как путем рассмотрения многократного рассеяния на кластерах, так и с помощью параметров ближнего и дальнего порядков. Отметим, что развитый в работах [9, 10] метод учета статистических корреляций при рассеянии на нескольких атомах отличается от развитых ранее (например, в работах [2, 3]). В указанном методе в качестве нулевого одноузельного приближения выбрано ПКП, которое пригодно, вообще говоря, для любых концентраций компонент сплава. Затем находятся поправки к ПКП путем суммирования вкладов процессов рассеяния на двух, трех и т. д. атомах и показывается, что вклады соответствующих процессов рассеяния быстро убывают с увеличением числа частиц в кластере в достаточно широкой области изменения параметров.

Аналитические выражения для электропроводности получены с учетом вкладов процессов рассеяния на парах атомов в предположении (обоснованном), что вклады процессов рассеяния на трех и более атомах в соответствии со сказанным ранее малы по сравнению с учтенными.

Гамильтониан, описывающий одноэлектронные состояния бинарного сплава, можно представить в виде [9]

$$H = \sum_{(in)} |in\rangle v_{in} \langle in| + \sum_{\substack{(in) \\ (jm) \neq (in)}} |in\rangle h_{nm}^{jj} \langle jm|, \quad (1)$$

где  $h_{nm}^{jj}$  — недиагональный в представлении Ванье матричный элемент гамильтониана (интеграл перескока), который в принятом приближении диагонального беспорядка не зависит от случайного распределения атомов;  $v_{in}$  — диагональный матричный элемент, принимающий значения  $v_A$  или  $v_B$  в зависимости от того, какой атом А или В находится в узле  $(in)$ ;  $|in\rangle$  — вектор состояния Ванье;  $i$  — номер подрешетки;  $n$  — номер узла подрешетки.

Добавим и вычтем в выражении (1) диагональный в узельном представлении трансляционно-инвариантный оператор

$$\sum_{(in)} |in\rangle \sigma_i \langle in|,$$

где  $\sigma_i$  — диагональный матричный элемент потенциала некоторой эффективной упорядоченной среды (когерентного потенциала), зависящий от номера подрешетки. В результате получим

$$H = \tilde{H} + \tilde{V}, \quad (2)$$

$$\tilde{H} = \sum_{(in)} |in\rangle \sigma_i \langle in| + \sum_{\substack{(in) \\ (jm) \neq (in)}} |in\rangle h_{nm}^{ij} \langle jm|,$$

$$\tilde{V} = \sum_{(in)} (v_{in} - \sigma_i) |in\rangle \langle in|.$$

Запаздывающая функция Грина сплава  $G(E^+) = (E^+ - H)^{-1}$ ,  $E^+ = E + i\delta$ ,  $\delta \rightarrow +0$ , аналитичная в верхней полуплоскости значений комплексной энергии  $E$ , связана с  $T$ -матрицей рассеяния соотношением

$$G = \tilde{G} + \tilde{G}T\tilde{G}, \quad (3)$$

где  $\tilde{G} = (E^+ - \tilde{H})^{-1}$  — функция Грина для эффективного гамильтониана  $\tilde{H}$  (2).

Воспользуемся полученным в работах [9, 10] кластерным перерасложением бесконечного ряда для  $T$ -матрицы рассеяния. Вклады в конфигурационно усредненную  $T$ -матрицу рассеяния от различных кластеров убывают с увеличением числа частиц в кластере, как все более высокие степени некоторого малого параметра  $\gamma$  [9, 10]. Пренебрегая вкладом процессов рассеяния на кластерах из трех и более атомов,  $T$ -матрицу можно представить в виде [9]

$$T = \sum_{(in)} \tau_{in} |in\rangle \langle in| + \sum_{\substack{(in) \\ (jm) \neq (in)}} \frac{\tau_{in}^2 \tau_{jm} \tilde{G}_{nm}^{ij} \tilde{G}_{mn}^{ji} |in\rangle \langle in| + \tau_{in} \tau_{jm} \tilde{G}_{nm}^{ij} |in\rangle \langle jm|}{1 - \tau_{in} \tau_{jm} \tilde{G}_{nm}^{ij} \tilde{G}_{mn}^{ji}}, \quad (4)$$

где  $\tau_{in}$  — диагональный матричный элемент одноцентрового оператора рассеяния, равный

$$\tau_{in} = (1 - (v_{in} - \sigma_i) \tilde{G}_{nn}^{ii})^{-1} (v_{in} - \sigma_i), \quad (5)$$

$$\tilde{G}_{nm}^{ij} \equiv \langle in| \tilde{G} |im\rangle.$$

Плотность одноэлектронных состояний  $g(E)$  (в расчете на один атом) связана с запаздывающей функцией Грина сплава  $G(E^+)$  соотношением

$$g(E) = -\frac{2}{\pi\nu N} \text{Im Sp} \langle G(E^+) \rangle, \quad (6)$$

где  $\nu$  — число подрешеток,  $N$  — число узлов подрешетки. Конфигурационное усреднение можно определить, используя случайные числа заполнения  $C_{in}^{\lambda}$  узла  $in$  атомом сорта  $\lambda$ , принимающие значения 1 или 0.

Подставляя формулу (4) в (3), проводя изложенным в работе [9] методом конфигурационное усреднение и подставляя результат в (6), получим

$$g(E) = -\frac{2}{\pi\nu} \text{Im} \left\{ \sum_i \tilde{G}_{00}^{ii} + \sum_{i,(j,m) \neq (i,0)} (A_m^{ij})^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij} + \varepsilon_m^{ij}) \times \right. \\ \left. \times \{ [ (x_i - y_i) + x_i y_i (x_j - y_j) a_m^{ij} a_{-m}^{ij} ] a_m^{ij} a_{-m}^{ij} (\tau_{jB} - \tau_{jA}) (\tilde{G}^2)_{00}^{ij} + \right. \\ \left. + [ 1 - x_i x_j y_i y_j (a_m^{ij} a_{-m}^{ij})^2 ] a_m^{ij} (\tau_{jB} - \tau_{jA}) (\tilde{G}^2)_{m0}^{ij} \} \right\}, \quad (7)$$

где

$$A_m^{ij} = (1 - y_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij}) (1 + x_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij}) (1 + x_j y_i a_m^{ij} a_{-m}^{ij}) (1 - x_i x_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij}),$$

$$a_m^{ij} = (\tau_{jB} - \tau_{jA}) \tilde{G}_{0m}^{ij},$$

$c_i^A = x_i$ ,  $c_i^B = y_i$  — вероятности замещения узлов подрешетки  $i$  атомами А, В, равные

$$x_i = x - \frac{\nu_2}{\nu} \eta, \quad y_i = 1 - x_i$$

для  $\nu_1$  подрешеток первого типа и

$$x_i = x - \frac{\nu_1}{\nu} \eta$$

для  $\nu_2$  подрешеток второго типа,  $\nu_1 + \nu_2 = \nu$ ,  $\eta$  — параметр дальнего порядка,  $x, y = 1 - x$  — концентрации компонент А, В сплава,  $\varepsilon_m^{ij} = \langle (c_{i0}^B - c_i^B) (c_{jm}^B - c_j^B) \rangle$  — параметры двухчастичных (парных) корреляций.

Поскольку в качестве нулевого приближения выбрана среда, характеризующаяся когерентным потенциалом, при получении выражения (7) требовалось, чтобы вклад в конфигурационно усредненную  $T$ -матрицу процессов рассеяния на каждом отдельном узле был равен нулю, т. е.

$$\langle \tau_{in} \rangle = 0, \quad \langle \tau_{in} \rangle = x_i \tau_{iA} + y_i \tau_{iB}, \\ \tau_{i\lambda} = (1 - (\nu_\lambda - \sigma_i) \tilde{G}_{00}^{ii})^{-1} (\nu_\lambda - \sigma_i), \quad (\lambda = A, B). \quad (8)$$

Это требование приводит к уравнению для когерентного потенциала подрешетки  $i$

$$\begin{aligned}\sigma_i &= \langle v_{in} \rangle - (v_A - \sigma_i) \tilde{G}_{00}^{ii} (v_B - \sigma_i), \\ \langle v_{in} \rangle &= x_i v_A + y_i v_B.\end{aligned}\quad (9)$$

Для расчета тензора статической электропроводности сплава при учете только упругого рассеяния воспользуемся формулой Кубо [16], которую представим в виде

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta} &= -\frac{e^2 \hbar}{2\pi N \Omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) \times \\ &\times \text{Sp} \langle v_\alpha (G(E^+) - G(E^-)) v_\beta (G(E^+) - G(E^-)) \rangle,\end{aligned}\quad (10)$$

где  $G(E^+)$ ,  $G(E^-)$  — соответственно запаздывающая и опережающая функции Грина ( $E^\pm = E \pm i0$ );  $v_\alpha$  — оператор  $\alpha$ -компоненты вектора скорости электрона;  $f(E, \mu)$  — функция Ферми;  $\Omega = \nu \Omega_0$ ;  $\mu$  — химический потенциал;  $\Omega_0$  — атомный объем.

В  $\mathbf{k}$ -представлении матричные элементы оператора  $v_\alpha$  имеют вид

$$v_{\alpha\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{jj} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{\mathbf{k}}^{jj}}{\partial k_\alpha}, \quad (11)$$

где  $h_{\mathbf{k}}^{jj}$  — Фурье-образ интеграла перескока

$$h_{nm}^{jj} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^{jj} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}_i - \mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_j)}. \quad (12)$$

Волновой вектор  $\mathbf{k}$  изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна упорядоченного сплава. Вектор  $\boldsymbol{\rho}_i$  определяет относительное положение узла подрешетки  $i$  в примитивной ячейке.

Подставляя формулы (3), (4) в выражение (10), проводя конфигурационное усреднение  $T$ -матрицы и ее произведения  $TT$ , получим

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha} &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi \nu \Omega_0} \text{Re} \sum_i \left\{ - [v_\alpha (\tilde{G} - \tilde{G}^+) v_\alpha (\tilde{G} - \tilde{G}^+)]_{00}^{jj} - \right. \\ &\quad \left. - 2 \sum_{(jm) \neq (i0)} (A_m^{jj})^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_m^{jj} a_{-m}^{jj} + \varepsilon_m^{jj}) \times \right. \\ &\quad \times \{ 2 [(x_i - y_i) + x_i y_i (x_j - y_j) a_m^{jj} a_{-m}^{jj}] a_m^{jj} a_{-m}^{jj} (\tau_{jB} - \tau_{jA}) [\tilde{G} v_\alpha (\tilde{G} - \tilde{G}^+) v_\alpha \tilde{G}]_{00}^{jj} + \\ &\quad + [1 - x_i x_j y_i y_j (a_m^{jj} a_{-m}^{jj})^2] [2 a_m^{jj} (\tau_{jB} - \tau_{jA}) [\tilde{G} v_\alpha (\tilde{G} - \tilde{G}^+) v_\alpha \tilde{G}]_{0m}^{jj} - \\ &\quad \left. - (\tau_{jB} - \tau_{jA}) (\tau_{jB} - \tau_{jA}) [\tilde{G} v_\alpha \tilde{G}]_{0m}^{jj} [\tilde{G} v_\alpha \tilde{G}]_{0m}^{jj}] \} - \\ &\quad - 4 \sum_{(jm) \neq (i0)} \text{Re} \left[ (A_m^{jj})^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_m^{jj} a_{-m}^{jj} + \varepsilon_m^{jj}) [1 - x_i x_j y_i y_j (a_m^{jj} a_{-m}^{jj})^2] \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{a_m^{jj}}{a_m^{jj} + a_m^{jj*}} \right] (\tau_{jB} - \tau_{jA})^* (\tau_{jB} - \tau_{jA}) [\tilde{G}^+ v_\alpha \tilde{G}]_{0m}^{jj} [\tilde{G} v_\alpha \tilde{G}^+]_{0m}^{jj} \Big\}_{E=\mu}.\end{aligned}\quad (13)$$

Стоящий в выражении (13) уровень Ферми  $\mu$  при низких температурах определяется уравнением

$$2Z = \int_{-\infty}^{\mu} g(E) dE, \quad (14)$$

где  $Z$  — отношение числа занятых к полному числу энергетических уровней в зоне.

Выражение (7) для плотности состояний и выражение (13) для электропроводности сплава получены при учете всех процессов многократного рассеяния на парах атомов и в пренебрежении вкладом от кластеров из трех и более атомов. Отношение неучтенных вкладов к вкладу от кластеров из двух атомов можно оценить величиной [9]

$$\gamma = \frac{1}{\nu} \sum_{i,j \neq i} x_i y_j |a_0^{ij}| |a_0^{ji}|. \quad (15)$$

Как показано в работе [9], величина  $\gamma$  может быть малой для довольно широкой области значений параметров теории. Вторым условием применимости полученных выражений является малость параметров межатомных корреляций  $\epsilon_m^{ij}$ .

В качестве примера рассмотрим бинарный упорядочивающийся сплав с ОЦК решеткой. В этом случае число подрешеток равно двум ( $\nu_1 = \nu_2 = 1$ ). Рассеяние на парах будем учитывать в приближении ближайших соседей на первой координационной сфере.

Матричные элементы функции Грина эффективной среды  $\tilde{G}_{\mathbf{k}}^{ij}$  в  $k$ -представлении имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{11} &= (E - \sigma_2) / D_{\mathbf{k}}, & \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{12} &= h_{\mathbf{k}}^{21} / D_{\mathbf{k}}, \\ \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{21} &= h_{\mathbf{k}}^{12} / D_{\mathbf{k}}, & \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{22} &= (E - \sigma_1) / D_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}} &= (E - \sigma_1)(E - \sigma_2) - h_{\mathbf{k}}^{12} h_{\mathbf{k}}^{21}, \\ h_{\mathbf{k}}^{12} &= h_{\mathbf{k}}^{21} = h(\mathbf{k}) = \sum_{\rho} h_{00}^{12} e^{i\mathbf{k}\cdot\rho}, \end{aligned}$$

$\rho$  — радиус-векторы ближайших соседей в сплаве.

Дисперсионную зависимость энергии электрона в чистом металле  $h(\mathbf{k})$  выберем в виде, соответствующем экспоненциальному убыванию с расстоянием между узлами интеграла перескока  $h_{nm}^{ij}$  ( $R_0$  — характерная длина убывания)

$$h(\mathbf{k}) = s(\mathbf{k}) - s(\mathbf{k}_m), \quad s(\mathbf{k}) = W [1 + (kR_0)^2]^{-1}, \quad W < 0. \quad (17)$$

Величина  $W$  в формуле (17) определяет положение дна зоны проводимости чистого металла. Появление постоянного слагаемого  $s(\mathbf{k}_m)$  в формуле (17) обусловлено выбором начала отсчета энергии в центре энергетической зоны ( $\mathbf{k}_m$  — максимальное значение модуля волнового вектора в первой зоне Бриллюэна упорядоченного сплава).

Переходя в выражениях (16) к узельному представлению по формуле (12) и заменяя суммирование по  $\mathbf{k}$  интегрированием, с учетом формулы (17) получим

$$\tilde{G}_{00}'' = \frac{E - \sigma_2}{A^2 - b^2} \left( 1 + \frac{\nu\Omega_0 W b}{\pi^2 R_0^2 (A^2 - b^2)} k_m \right) - \frac{\nu\Omega_0 (E - \sigma_2)}{8\pi^2 A R_0^3} \times$$

$$\times \left[ \frac{F^{1/2}}{B} (1 + F) \ln \frac{F^{1/2}/R_0 + k_m}{F^{1/2}/R_0 - k_m} + \frac{iD^{1/2}}{C} (1 - D) \ln \frac{iD^{1/2}/R_0 + k_m}{iD^{1/2}/R_0 - k_m} \right],$$

$$\tilde{G}_{00}^{22} = \frac{E - \sigma_1}{E - \sigma_2} \tilde{G}_{00}^{11}, \quad b = |W| [1 + (k_m R_0)^2]^{-1},$$

$$A = \sqrt{(E - \sigma_1)(E - \sigma_2)}, \quad B = A - b, \quad C = A + b,$$

$$D = (W + C)/C, \quad F = (W - B)/B,$$

$$k_m = [6\pi^2 / (\nu\Omega_0)]^{1/3}. \quad (18)$$

Формулы (9), (18) определяют значения когерентного потенциала для двух подрешеток.

На рис. 1, 2 представлены результаты численного расчета энергетической зависимости плотности электронных состояний (7) сплавов с различными значениями параметра дальнего порядка  $\eta$  и параметра корреляции для первой координационной сферы  $\varepsilon_0^{12}$ . Параметр  $R_0$  в формуле (17) выбирался равным  $R_0 = 0.2 a$ ,  $a$  — постоянная решетки. Полуширина энергетической зоны  $|W - s(k_m)|$  полагалась равной единице. Потенциал «примесного» рассеяния  $\delta = \nu_B - \nu_A = -0.5$ . Концентрация сплава  $y = 0.5$ .

На рис. 1 приведена плотность состояний неупорядоченного сплава для различных значений параметра корреляции:  $\varepsilon_0^{12} = 0$  (а),  $-0.05$  (б),  $-0.08$  (в), а на рис. 2 — плотность состояний упорядочивающегося сплава:  $\eta = 0.4$ ,  $\varepsilon_0^{12} = -0.1$  (а),  $\eta = 0.98$ ,  $\varepsilon_0^{12} = 0$  (б). Штриховые кривые — значения плотности состояний, вычисленные в ПКП и соответствующие первому слагаемому в формуле (7); сплошные кривые — плотность состояний, вычисленная в двухузельном приближении по формуле (7).

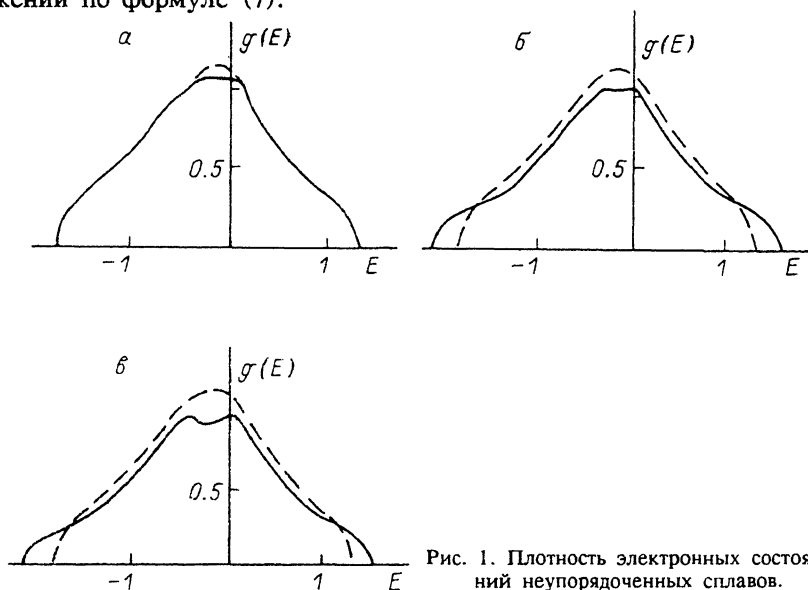


Рис. 1. Плотность электронных состояний неупорядоченных сплавов.

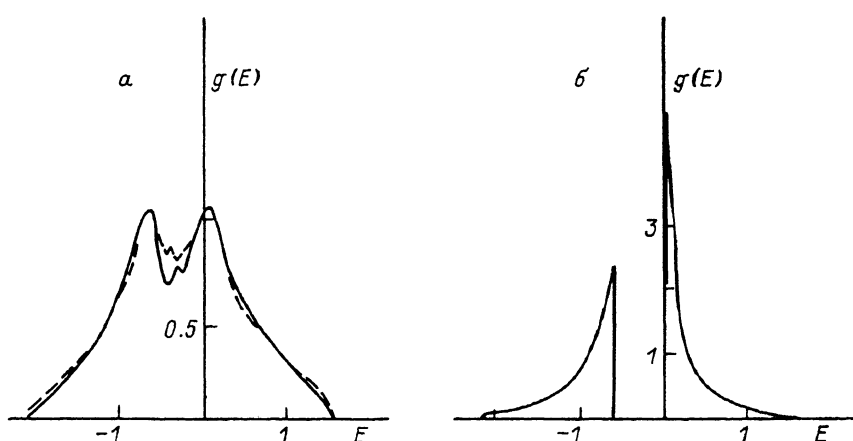


Рис. 2. Плотность электронных состояний упорядочивающихся сплавов.

Как следует из рис. 1, ближнее упорядочение приводит к появлению на кривой энергетической зависимости плотности состояний характерного провала в области энергий, соответствующих границе зоны Бриллюэна упорядоченного сплава. С возрастанием степени ближнего упорядочения величина провала возрастает, что представляет собой тенденцию к расщеплению энергетической зоны при установлении дальнего порядка (рис. 2).

Вкладом пар в плотность состояний разупорядоченного сплава ( $\eta = 0$ ,  $\epsilon_0^{12} = 0$ ) и почти полностью упорядоченных сплавов ( $\eta \sim 1$ ) можно пренебречь (штриховая и сплошная кривые на рис. 2, б неразличимы). Однако для частично упорядоченных сплавов ( $\eta \sim 0.5$ ) этот вклад может быть значительным.

На рис. 3 представлены результаты расчета электропроводности сплавов, выполненного по формулам (13), (9), (18), (16), (17), (11), (14), (7). Расчеты выполнены в одноузельном приближении (соответствующем первому слагаемому в формуле (13)) для различных значений электронной концентрации, характеризующей величиной  $Z$  (см. формулу (14)).

В случае  $Z = 0.8$ , когда уровень Ферми  $\mu$  находится вне щели, поведение электропроводности при упорядочении подчиняется закону Смирнова [11]: с возрастанием параметра дальнего порядка  $\eta$  электропроводность  $\sigma$  увеличивается (рис. 3, а).

При  $Z = 0.5$ , когда уровень Ферми сплава находится в центре щели, поведение электропроводности обратное: с возрастанием параметра дальнего порядка она существенно уменьшается (рис. 3, б).

При  $Z = 0.6$  уровень Ферми  $\mu$  разупорядоченного сплава находится между центром и правым краем щели, возникающей при упорядочении (рис. 2). С упорядочением сплава уровень Ферми  $\mu$  сдвигается вправо и при установлении дальнего порядка выходит из области щели. (На рис. 3 в точки С и К обозначают положения центра и края щели). Этим объясняется немонотонное изменение удельного остаточного электросопротивления сплава  $\rho = 1/\sigma$  с увеличением параметра дальнего порядка  $\eta$  (рис. 3, в).

В таблице представлены результаты расчета электропроводности сплавов для различных значений параметра дальнего порядка  $\eta$  и параметра парной корреляции  $\epsilon_0^{12}$  и двух значений электронной концентрации  $Z$ . Через  $\sigma^{(1)}$  обозначена электропроводность сплава (13), вычисленная в одноузельном приближении, а через  $\sigma$  — с учетом пар.

Как следует из таблицы, вкладом пар в электропроводность разупорядоченных сплавов ( $\eta = 0$ ,  $\epsilon_0^{12} = 0$ ) и почти полностью упорядоченных сплавов ( $\eta \sim 1$ ) можно



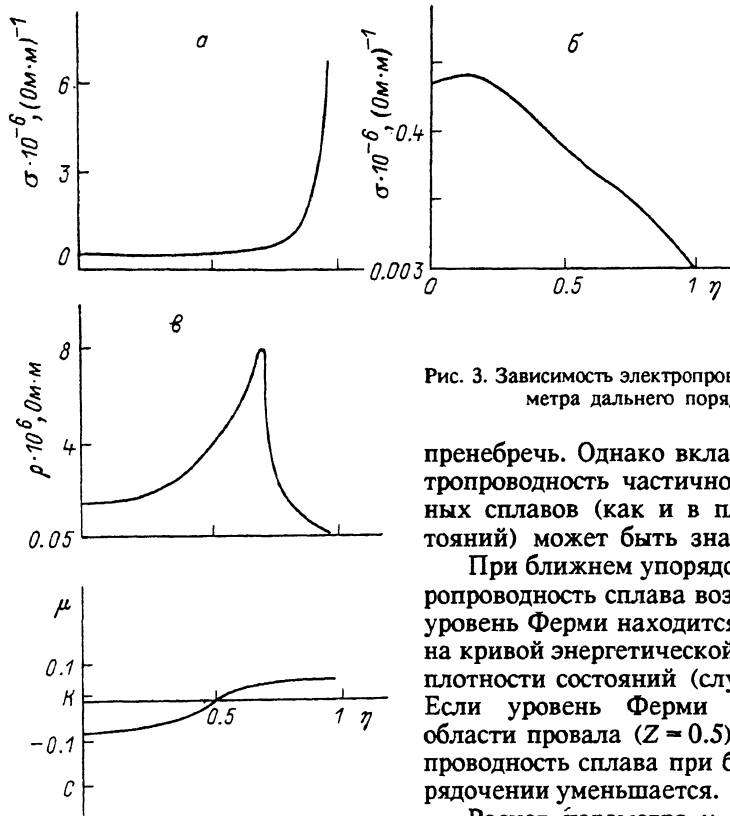


Рис. 3. Зависимость электропроводности от параметра дальнего порядка  $\eta$ .

пренебречь. Однако вклад пар в электропроводность частично упорядоченных сплавов (как и в плотность состояний) может быть значительным.

При ближнем упорядочении электропроводность сплава возрастает, если уровень Ферми находится вне провала на кривой энергетической зависимости плотности состояний (случай  $Z = 0.9$ ). Если уровень Ферми находится в области провала ( $Z = 0.5$ ), то электропроводность сплава при ближнем упорядочении уменьшается.

Расчет параметра  $\gamma$  (15) показывает, что его значения максимальны для энергий, лежащих в области щели и на краю зоны. Однако в рассмотренных в работе случаях его значения в области щели не превышают 0.05, что указывает на применимость парного приближения для описания рассмотренных выше эффектов в изменении энергетического спектра и электропроводности сплава при его упорядочении.

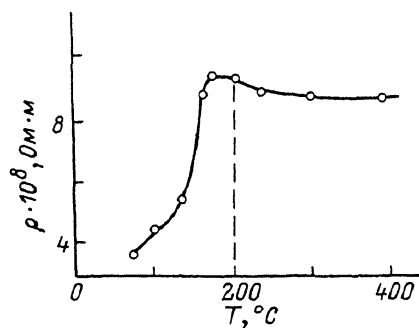
Экспериментальному исследованию влияния упорядочения на электросопротивление сплавов посвящено множество работ (см. [11]). В большинстве из них исследованы случаи, когда остаточное электросопротивление описывается указанным выше законом Смирнова, т. е. монотонно убывает с упорядочением сплава.

Однако поведение остаточного электросопротивления некоторых сплавов при их упорядочении проявляет более сложный характер [17–19]. В работе [17] обнаружено, что остаточное электросопротивление сплава  $\text{CuAu}_3$  немонотонно изменяется в зависимости от температуры отжига в окрестности точки  $T_k = 200$

Вклад пар в электропроводность упорядочивающихся сплавов

$\eta$	$\epsilon_0^{12}$	$\sigma^1 \cdot 10^{-6}, (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$		$\sigma^1 \cdot 10^{-6}, (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$	
		$Z = 0.9$	$Z = 0.5$	$Z = 0.9$	$Z = 0.5$
0	0	0.337	0.543	0.340	0.549
0	-0.05	0.337	0.543	0.359	0.474
0	-0.08	0.337	0.543	0.377	0.430
0.4	-0.1	0.389	0.433	0.471	0.254
0.98	0	1.63	$0.347 \cdot 10^{-2}$	1.63	$0.343 \cdot 10^{-2}$

Рис. 4. Зависимость остаточного удельного электросопротивления сплава  $\text{CuAu}_2$  от температуры отжига [17].



$^\circ\text{C}$ , соответствующей температуре фазового перехода порядок—беспорядок. Указанные результаты работы [17] представлены на рис. 4. Учитывая, что уровень Ферми данного сплава одновалентных элементов лежит в  $s$ -зоне в области, возникающей при дальнейшем упорядочении энергетической щели, естественно предположить, что немонокотное поведение электросопротивления сплава обусловлено существенным изменением энергетического спектра электронов. Численный расчет поведения остаточного электросопротивления модельного сплава при его упорядочении в этом случае приведен на рис. 3, в. Аналогичное поведение обнаруживает сплав  $\text{Co—72.1 ат.}\%$  Fe вблизи температуры  $T_k = 300^\circ\text{C}$  [18], а также сплав  $\text{Fe—25.5 ат.}\%$  Al [19]. Представляется интересной с этой точки зрения исследованная в работе [20] температурная зависимость электросопротивления сплавов  $\text{Cr—Al}$ , которые при концентрации  $\sim 23.5 \text{ ат.}\%$  Al обнаруживают полупроводниковые свойства, а при меньших и больших по отношению к указанной концентрациях являются металлами.

Приведенные экспериментальные результаты, безусловно, не могут служить достоверным подтверждением существования теоретически исследованных в настоящей работе эффектов влияния изменения энергетического спектра при упорядочении на электропроводность сплавов. Для этого требуются, в частности, измерения как электропроводности, так и параметров ближнего и дальнего порядков сплава. Отсутствие таких исследований можно, по-видимому, объяснить тем, что до настоящего времени не было количественной теории указанных эффектов, несмотря на то что последние были качественно предсказаны еще в работах Смирнова [11].

Авторы надеются, что результаты настоящей работы будут способствовать более детальному экспериментальному и теоретическому исследованию энергетических спектров и электропроводности упорядочивающихся сплавов.

#### Список литературы

- [1] Эренрейх Г., Шварц Л. Электронная структура сплавов. М., 1979. 200 с.
- [2] Aiyer R. N., Elliott R. J., Krymhansl J. A., Leath P. L. // Phys. Rev. 1969. V. 181. N 3. P. 1006—1014.
- [3] Leath P. L. // J. Phys. 1973. V. C6. N 9. P. 1559—1571.
- [4] Mills R., Ratenavararaksa P. // Phys. Rev. 1978. V. B18. N 10. P. 5291—5308.
- [5] Mookerjee A. // J. Phys. 1973. V. C6. N 10. P. 1205—1208.
- [6] Лось В. Ф. // ТМФ. 1987. Т. 73. № 1. С. 85—102.
- [7] Токарь В. И., Масанский И. В. // ФММ. 1987. Т. 64. № 6. С. 1207—1211.
- [8] Ведяев А. В. // ТМФ. 1977. Т. 31. № 3. С. 392—404.
- [9] Гаркуша В. В., Лось В. Ф., Репецкий С. П. // ТМФ. 1990. Т. 84. № 1. С. 91—100.
- [10] Кулиш Н. П., Петренко П. В., Репецкий С. П., Шатный Т. Д. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 11. С. 3185—3196.
- [11] Смирнов А. А. Теория электросопротивления сплавов. Киев, 1960. 148 с.
- [12] Ведяев А. В., Грановский А. Б., Кондорский Е. И., Котельникова О. А. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 4. С. 961—967.
- [13] Бородачев С. М. // Изв. вузов, физика. 1978. № 5. С. 59—63.
- [14] Кулиш Н. П., Петренко П. В., Репецкий С. П., Шатный Т. Д. // ФММ. 1990. № 10. С. 51—60.
- [15] Бородачев С. М., Волков В. А., Машаров С. И. // ФММ. 1976. Т. 42. № 6. С. 1147—1153.
- [16] Velicky B. // Phys. Rev. 1969. V. 184. N 3. P. 614—627.
- [17] Korevaar B. M. // Physica. 1959. V. 25. N 5. P. 1021—1025.

- [18] Виттинг Л. М. // Журн. неорг. химии. 1957. Т. 2. № 4. С. 845—851.  
[19] Masumoto H., Saito H. // *Sci. Rep. Res. Inst. Toh. Univ.* 1957. V. A9. N 2. P. 338—343.  
[20] Chakrabarti B. J., Beck P. A. // *J. Phys. Chem. Sol.* 1971. V. 32. N 7. P. 1609—1615.

Киевский государственный университет  
им. Т. Г. Шевченко  
Институт металлофизики АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
17 июня 1991 г.  
В окончательной редакции  
31 октября 1991 г.

---