

# Плотность электронных состояний и электропроводность упорядочивающихся сплавов. Выход за рамки однозонного приближения с учетом рассеяния на кластерах

© Н.П. Кулиш, С.П. Репецкий, Е.Г. Лень, Т.С. Пастушенко

Киевский государственный университет,  
252022 Киев, Украина

(Поступила в Редакцию 6 августа 1996 г.)

Развит метод выхода за рамки однозонного приближения с учетом рассеяния на кластерах. Метод основан на кластерном разложении для усредненной функции Грина сплава. Показано, что вклады процессов рассеяния убывают с увеличением числа частиц в кластере по некоторому малому параметру. В приближении диагонального беспорядка в многозонной  $s-d$ -модели проведены численные исследования особенностей электронной структуры и электропроводности упорядочивающихся сплавов.

Значительные успехи в объяснении свойств сплавов и других неупорядоченных конденсированных систем связаны с применением методов теории многократного рассеяния, и в том числе одноузельного приближения когерентного потенциала (ПКП) [1]. Однако для учета статистических корреляций при многократном рассеянии электронов на разных узлах решетки, а также ближнего порядка в расположении атомов требуется выйти за рамки одноузельного приближения, т. е. учесть рассеяние на кластерах.

Кластерные обобщения ПКП, основанные на рассмотрении одиночного кластера в эффективной среде, не гарантируют аналитичности и трансляционной инвариантности, усредненной по различным расположениям атомов функции Грина [2]. В развитом в работе [3] приближении "блуждающего кластера" решена задача построения самосогласованной аппроксимации, учитывающей рассеяние на кластерах при сохранении аналитичности и трансляционной инвариантности, усредненной по конфигурациям функции Грина системы. Однако в этом методе не учитываются корреляции в расположении атомов (ближний и дальний порядок). Метод присоединенного пространства [4,5], эквивалентность которого методу [3] доказана в [6], развит также для неупорядоченных систем. Существующие попытки обобщения этого метода на случай сплавов с ближним порядком [7–10] связаны со значительными трудностями.

Необходимо также подчеркнуть, что в упомянутых подходах трудно оценить точность сделанных приближений, поскольку не вводится какой-либо малый параметр.

Обобщения ПКП, использующие разложение выражения для полной  $T$ -матрицы рассеяния или массового оператора по некоторому малому параметру, позволяют рассчитать поправки к ПКП и оценить точность метода. Отметим здесь развитый в работах [11–13] метод разложения по  $R_0^{-3}$  ( $R_0$  — длина затухания интеграла перескока в единицах постоянной

решетки сплава). Однако применение этого метода ограничено требованием большого  $R_0^{-3}$ .

В [14–18] развит метод учета статистических корреляций при рассеянии электронов в сплаве, основанный на кластерном разложении для конфигурационно усредненной функции Грина. В качестве нулевого одноузельного приближения в этом методе выбирается ПКП, которое пригодно, вообще говоря, для любых концентраций компонента сплава. Затем находят поправки к ПКП путем суммирования вкладов процессов рассеяния на кластерах из двух, трех и т. д. атомов. Показано, что вклады соответствующих процессов рассеяния убывают с увеличением числа частиц в кластере по некоторому малому параметру. Исследование этого параметра показывает, что он может быть малым в широкой области изменения характеристик сплава (включая концентрацию компонентов), за исключением узкого интервала значений энергии на краю зоны [17,18].

Целью данной работы является выход за рамки однозонного приближения с учетом рассеяния на кластерах. В многозонной  $s-d$ -модели в приближении диагонального беспорядка исследовано влияние ближнего упорядочения на энергетический спектр и электропроводность сплавов переходных металлов.

## 1. Плотность электронных состояний

Гамильтониан, описывающий одноэлектронные состояния сплава в узельном представлении, имеет вид

$$H = H_0 + V,$$

$$H_0 = \sum_{\substack{\gamma_1, \gamma_2 \\ (i_1 n_1), (i_2 n_2) \neq (i_1 n_1)}} |\gamma_1 i_1 n_1\rangle h_{i_1 n_1 i_2 n_2}^{\gamma_1 \gamma_2} \langle \gamma_2 i_2 n_2|,$$

$$V = \sum_{(in)} V_{in}, \quad V_{in} = \sum_{\gamma_1, \gamma_2} |\gamma_1 in\rangle V_{in}^{\gamma_1 \gamma_2} \langle \gamma_2 in|, \quad (1)$$

где  $h_{i_1 n_1 i_2 n_2}^{\gamma_1 \gamma_2}$  — недиагональный по индексам узлов решетки  $(in)$  матричный элемент трансляционно-инвариантной части гамильтониана (интеграл перескока); который в принятом здесь приближении диагонального беспорядка не зависит от случайного распределения атомов,  $V_{in}^{\gamma_1, \gamma_2}$  — диагональный по индексам узлов матричный элемент случайной части гамильтониана сплава, принимающий значения  $V_{in}^{\gamma_1 \gamma_2}$  или  $V_{in}^{B \gamma_1 \gamma_2}$  в зависимости от того, какой атом,  $A$  или  $B$ , находится в узле  $(in)$ ,  $|\gamma_1 i_1 n_1\rangle$  — собственный вектор Ваннье,  $\gamma_1$  — индекс энергетической зоны,  $i_1$  — номер подрешетки,  $n_1$  — номер узла подрешетки.

Введем диагональный по индексам узлов решетки трансляционно-инвариантный оператор

$$\sigma = \sum_{\gamma_1 \gamma_2, (in)} |\gamma_1 in\rangle \sigma_i^{\gamma_1 \gamma_2} \langle \gamma_2 in|, \quad (2)$$

представляющий потенциал (когерентный потенциал) некоторой эффективной упорядоченной среды. Значения величин  $\sigma_i^{\gamma_1 \gamma_2}$  определены далее.

Добавляя и вычитая в выражении (1) оператор  $\sigma$ , гамильтониан сплава можно представить в виде

$$H = \tilde{H} + \tilde{V},$$

$$\begin{aligned} \tilde{H} = H_0 + \sigma &= \sum_{\substack{\gamma_1, \gamma_2 \\ (i_1 n_1), (i_2 n_2) \neq (i_1 n_1)}} |\gamma_1 i_1 n_1\rangle h_{i_1 n_1 i_2 n_2}^{\gamma_1 \gamma_2} \langle \gamma_2 i_2 n_2| \\ &+ \sum_{\gamma_1, \gamma_2, (in)} |\gamma_1 in\rangle \sigma_i^{\gamma_1 \gamma_2} \langle \gamma_2 in|, \\ \tilde{V} = V - \sigma &= \sum_{(in)} \tilde{V}_{in}, \end{aligned}$$

$$\tilde{V}_{in} = V_{in} - \sigma_i = \sum_{\gamma_1, \gamma_2} |\gamma_1 in\rangle (V_{in}^{\gamma_1 \gamma_2} - \sigma_i^{\gamma_1 \gamma_2}) \langle \gamma_2 in|. \quad (3)$$

Запаздывающая функция Грина сплава  $G(E) = (E - H)^{-1}$ , аналитичная в верхней полуплоскости значений комплексной энергии  $E$ , удовлетворяет уравнению Дайсона

$$G = \tilde{G} + \tilde{G} \tilde{V} G, \quad (4)$$

где

$$\tilde{G} = (E - \tilde{H})^{-1} \quad (5)$$

— функция Грина для эффективного гамильтониана  $\tilde{H}$  в формуле (3).

Оператор  $T$ -матрицы рассеяния на случайном потенциале  $\tilde{V}$  определяется соотношением

$$G = \tilde{G} + \tilde{G} T \tilde{G} \quad (6)$$

и удовлетворяет уравнению

$$T = \tilde{V} + \tilde{V} \tilde{G} T, \quad (7)$$

следующему из формул (4), (6).

Для любого оператора  $A$  справедливо непосредственно проверяемое тождество

$$B_{in} A B_{jm} = B_{in} A_{injm} B_{jm}, \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} B_{in} &= \sum_{\gamma_1, \gamma_2} |\gamma_1 in\rangle B_{in}^{\gamma_1 \gamma_2} \langle \gamma_2 in|, \\ A_{injm} &= \sum_{\gamma_1, \gamma_2} |\gamma_1 in\rangle A_{injm}^{\gamma_1 \gamma_2} \langle \gamma_2 jm|. \end{aligned}$$

Представим  $T$ -матрицу рассеяния в виде

$$T = \sum_{(in)} T_{in}. \quad (9)$$

Используя тождество (8), подставим выражение (3) для потенциала рассеяния  $\tilde{V}$  и выражение (9) в уравнение (7); выделяя в последнем слагаемые с  $T_{in}$  и решая его относительно  $T_{in}$ , получим

$$T_{in} = t_{in} + t_{in} \sum_{(jm) \neq (in)} \tilde{G}_{nm}^{ij} T_{jm}, \quad (10)$$

где

$$t_{in} = (I - \tilde{V}_{in} \tilde{G}_{nm}^{ii})^{-1} \tilde{V}_{in}, \quad (11)$$

$I$  — единичный оператор.

Продолжим выделение оператора  $T_{in}$  из системы уравнений, состоящей из уравнений (10) и аналогичных уравнений для  $T_{jm}$  при  $(jm) \neq (in)$ . Для этого в уравнениях для  $T_{jm}$  выделим слагаемое, содержащее  $T_{in}$ , подставим эти выражения для  $T_{jm}$  в выражение (10) и решим полученное уравнение относительно  $T_{in}$ . В результате получим

$$\begin{aligned} T &= \sum_{(i_1 n_1)} T_{i_1 n_1} \\ &= \sum_{(i_1 n_1)} (I - l_{i_1 n_1})^{-1} \left[ t_{i_1 n_1} + \sum_{(i_2 n_2) \neq (i_1 n_1)} t_{i_1 n_1} \tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2} t_{i_2 n_2} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\substack{(i_2 n_2) \neq (i_1 n_1) \\ (i_3 n_3) \neq (i_2 n_2), (i_1 n_1)}} t_{i_1 n_1} \tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2} t_{i_2 n_2} \tilde{G}_{n_2 n_3}^{i_2 i_3} T_{i_3 n_3} \right], \\ l_{i_1 n_1} &= \sum_{(i_2 n_2) \neq (i_1 n_1)} t_{i_1 n_1} \tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2} t_{i_2 n_2} \tilde{G}_{n_2 n_1}^{i_2 i_1}. \quad (12) \end{aligned}$$

Пренебрегая процессами рассеяния на трех и более центрах, третье слагаемое правой части выражения (12) можно не учитывать, а в первых двух следует учесть только суммы по одному  $(i_1 n_1)$  и двум индексам  $(i_1 n_1)$ ,  $(i_2 n_2) \neq (i_1 n_1)$ .

В результате получим

$$\begin{aligned} T &= \sum_{(i_1 n_1)} t_{i_1 n_1} + \sum_{\substack{(i_1 n_1) \\ (i_2 n_2) \neq (i_1 n_1)}} (I - t_{i_1 n_1} \tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2} t_{i_2 n_2} \tilde{G}_{n_2 n_1}^{i_2 i_1})^{-1} \\ &\quad \times t_{i_1 n_1} \tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2} t_{i_2 n_2} (I + \tilde{G}_{n_2 n_1}^{i_2 i_1} t_{i_1 n_1}). \quad (13) \end{aligned}$$

При необходимости учета процессов рассеяния на трех и более центрах изложенную выше процедуру выделения операторов  $T_{in}$  следует продолжить (см. [15,19]).

Плотность электронных состояний определяется усредненной по различным расположениям атомов (конфигурационно усредненной) функцией Грина сплава (6).

Усредним выражение (13) по различным конфигурациям с учетом статистических межатомных корреляций. Конфигурационное усреднение можно определить, используя случайные числа заполнения  $c_{in}^\lambda$ , принимающие значение, равное единице или нулю, в зависимости от того, присутствует или нет в узле ( $in$ ) атом сорта  $\lambda$ . Тогда любая случайная величина  $X_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l}$ , зависящая от индексов узлов ( $i_1 n_1$ ), ( $i_2 n_2$ ), ..., ( $i_l n_l$ ), может быть представлена в виде

$$X_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l} = \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_l} c_{i_1 n_1}^{\lambda_1} c_{i_2 n_2}^{\lambda_2} \dots c_{i_l n_l}^{\lambda_l} X_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l}^{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_l}, \quad (14)$$

где  $X_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l}^{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_l}$  — спектр значений данной случайной величины. Используя свойство случайных чисел

$$\sum_{\lambda} c_{in}^{\lambda} = 1,$$

можно показать, что для бинарного сплава

$$c_{in}^{\lambda} = c_i^{\lambda} + (c_{in}^B - c_i^B)(\delta_{\lambda B} - \delta_{\lambda A}), \quad \lambda = A, B,$$

$$\begin{aligned} \bar{P}_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l}^{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_l} &= \bar{P}_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l}^{BB \dots B} (\delta_{\lambda_1 B} - \delta_{\lambda_1 A}) \\ &\times (\delta_{\lambda_2 B} - \delta_{\lambda_2 A}) \dots (\delta_{\lambda_l B} - \delta_{\lambda_l A}), \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$c_i^{\lambda} \equiv \langle c_{in}^{\lambda} \rangle,$$

$\bar{P}_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l}^{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_l} \equiv \langle (c_{i_1 n_1}^{\lambda_1} - c_{i_1}^{\lambda_1})(c_{i_2 n_2}^{\lambda_2} - c_{i_2}^{\lambda_2}) \dots (c_{i_l n_l}^{\lambda_l} - c_{i_l}^{\lambda_l}) \rangle$ ,  
 $c_i^A = x_i$ ,  $c_i^B = y_i$  — вероятности замещения узлов  $i$ -й подрешетки атомами  $A$ ,  $B$ , равные (в случае кристаллов кубической симметрии)

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

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 компонентов  $A$ ,  $B$  сплава,  $\delta_{\lambda A}$ ,  $\delta_{\lambda B}$  — символы Кронекера. Скобки  $\langle \dots \rangle$  в формуле (15) обозначают конфигурационное усреднение.

Поскольку в качестве нулевого приближения выбрана среда, характеризуемая когерентным потенциалом (см. (2)–(6)), потребуем, чтобы вклад в конфигурационно усредненную  $T$ -матрицу процессов рассеяния на каждом отдельном узле был равен нулю, т.е.

$$\langle t_{in} \rangle = 0, \quad \langle t_{in} \rangle = x_i t_{in}^A + y_i t_{in}^B, \quad (16)$$

где

$$t_{in}^{\lambda} = \left[ I - (V_{in}^{\lambda} - \sigma_i) \tilde{G}_{mn}^{ii} \right]^{-1} (V_{in}^{\lambda} - \sigma_i), \quad \lambda = A, B. \quad (17)$$

Выполнение условия (16) приводит к уравнению для когерентного потенциала

$$\begin{aligned} \sigma_i &= \langle V_{i0} \rangle - (V_{i0}^A - \sigma_i) \tilde{G}_{00}^{ii} (V_{i0}^B - \sigma_i), \\ \langle V_{i0} \rangle &= x_i V_{i0}^A + y_i V_{i0}^B. \end{aligned} \quad (18)$$

Величины  $t_{in}^{\lambda}$ , возникающие при конфигурационном усреднении  $T$ -матрицы, удовлетворяют вытекающим из условия (16) соотношениям

$$t_{in}^A = -y_i (t_{in}^B - t_{in}^A), \quad t_{in}^B = x_i (t_{in}^B - t_{in}^A). \quad (19)$$

Матричные элементы функции Грина эффективной среды (5) определяются выражением (см. (8))

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{i_1 n_1 i_2 n_2}^{\gamma_1 \gamma_2} &\equiv \langle \gamma_1 i_1 n_1 | \tilde{G} | \gamma_2 i_2 n_2 \rangle = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{\gamma_1 i_1 \gamma_2 i_2} \\ &\times \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_{n_1} + \boldsymbol{\rho}_{i_1} - \mathbf{r}_{n_2} - \boldsymbol{\rho}_{i_2})], \end{aligned} \quad (20)$$

где величины  $\tilde{G}_{\mathbf{k}}^{\gamma_1 i_1 \gamma_2 i_2}$ , определяющие функцию Грина в  $\mathbf{k}$ -представлении, являются элементами матрицы

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}} = \left\| \left( E \delta_{\gamma_1 \gamma_2} - \sigma_{i_1}^{\gamma_1 \gamma_2} \right) \delta_{i_1 i_2} - h_{\mathbf{k}}^{\gamma_1 i_1 \gamma_2 i_2} \right\|^{-1},$$

$h_{\mathbf{k}}^{\gamma_1 i_1 \gamma_2 i_2}$  — фурье-образ интеграла перескока  $h_{i_1 n_1 i_2 n_2}^{\gamma_1 \gamma_2}$ ,  $\mathbf{r}_{n_1}$  определяет начало координат  $n_1$ -й элементарной ячейки упорядоченного сплава,  $\boldsymbol{\rho}_{i_1}$  — положение узла  $i_1$ -й подрешетки в элементарной ячейке,  $N$  — число элементарных ячеек. Волновой вектор  $\mathbf{k}$  в формуле (20) изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна упорядоченного сплава.

Конфигурационное усреднение становится более наглядным, если представить усредненную  $T$ -матрицу в виде диаграмм (рис. 1), принцип построения которых вытекает из выражений (9), (10), (14)–(16). Прямая линия с точкой обозначает оператор рассеяния для атома сорта  $\lambda$  в узле ( $in$ )  $t_{in}^{\lambda}$  (17), причем разным точкам соответствуют различные узлы решетки. Горизонтальная линия изображает  $\tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2}$ . Точкам, соединенным волнистой линией, приписывается множитель  $\bar{P}_{i_1 n_1 i_2 n_2 \dots i_l n_l}^{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_l}$ , каждой из остальных точек —  $\langle c_{in}^{\lambda} \rangle = c_i^{\lambda}$ . По внутренним индексам ( $i_1 n_1$ ), ( $i_2 n_2$ ), ..., а также по  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$  предполагается суммирование. На рис. 1,  $a, b$  изображены члены усредненной  $T$ -матрицы, описывающие рассеяние на парах узлов. При этом на рис. 1,  $a$  представлены члены без учета статистических межатомных корреляций. Графики на рис. 1,  $b$  учитывают парные корреляции, определяемые параметрами корреляций  $\bar{P}_{injm}^{BB} \equiv \varepsilon_{nm}^{ij}$ . На рис. 1,  $c$  приведены также первые диаграммы, описывающие процессы рассеяния на группах из трех атомов.

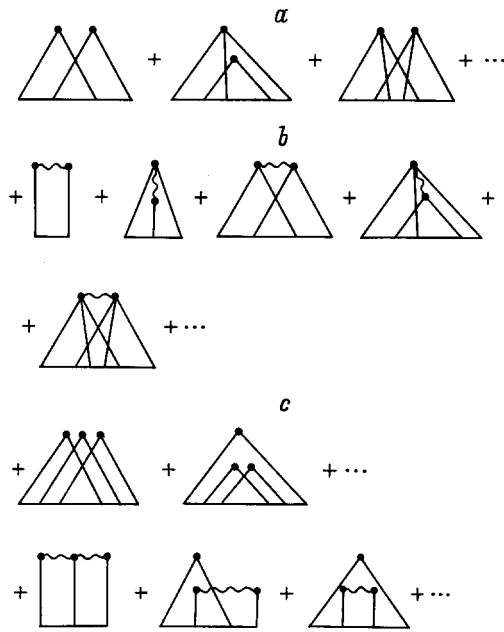


Рис. 1. Диаграммный ряд для конфигурационно усредненной  $T$ -матрицы рассеяния.

Если определить когерентный потенциал  $\sigma_i$  с помощью условия (16), то все диаграммы, содержащие точку с одной выходящей линией, вносят нулевой вклад. Указанные диаграммы на рис. 1 отсутствуют. Учитывая (19), вклады диаграмм (рис. 1,  $a, b$ ), описывающих рассеяние на парах узлов, можно свести к точно суммируемым рядам геометрической прогрессии. К этому же результату приводит усреднение выражения (13) для  $T$ -матрицы с помощью формул (14)–(16), (19).

Таким образом, для конфигурационно усредненной  $T$ -матрицы в пренебрежении вкладом процессов рассеяния на кластерах из трех и более атомов получим

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_{\mathbf{k}}^{i_1 i_2} &= \sum_{(jm) \neq (i_1 0)} \left( A_{0m}^{i_1 j} \right)^{-1} \left( x_{i_1} x_j y_{i_1} y_j a_{0m}^{i_1 j} a_{m0}^{j i_1} + \varepsilon_{0m}^{i_1 j} \right) \\ &\times \left\{ \left[ x_{j_1} - y_{j_1} + x_{i_1} y_{i_1} (x_j - y_j) a_{0m}^{i_1 j} a_{m0}^{j i_1} \right] \right. \\ &\times a_{0m}^{i_1 j} a_{m0}^{j i_1} \left( t_{i_1 0}^B - t_{i_1 0}^A \right) \delta_{i_1 i_2} + \left[ 1 - x_{i_1} x_j y_{i_1} y_j \left( a_{0m}^{i_1 j} a_{m0}^{j i_1} \right)^2 \right] \\ &\times a_{0m}^{i_1 j} \left( t_{j_0}^B - t_{j_0}^A \right) e^{[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_m + \boldsymbol{\rho}_{i_2} - \boldsymbol{\rho}_{i_1})]} \delta_{j i_2} \left. \right\}, \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} A_{0m}^{ij} &= \left( I - y_i y_j a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} \right) \left( I + x_j y_j a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} \right) \\ &\times \left( I + x_i y_i a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} \right) \left( I - x_j y_j a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} \right), \\ a_{0m}^{ij} &= (t_{i_0}^B - t_{i_0}^A) \tilde{G}_{0m}^{ij}. \end{aligned} \quad (22)$$

Величины, стоящие в выражениях (21), (22), являются матрицами по отношению к индексам энергетических зон  $\gamma_1, \gamma_2$ .

Плотность электронных состояний, приходящаяся на один атом, равна

$$g(E) = -\frac{2}{\pi N \nu} \text{Im Sp} \langle G(E) \rangle = -\frac{2}{\pi N \nu} \text{Im} \sum_{\gamma i \mathbf{k}} \langle G \rangle_{\mathbf{k}}^{\gamma i \gamma i}, \quad (23)$$

где

$$\langle G \rangle_{\mathbf{k}} = \tilde{G}_{\mathbf{k}} + \tilde{G}_{\mathbf{k}} \langle T \rangle_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{\mathbf{k}}. \quad (24)$$

## 2. Электропроводность сплава

Для расчета тензора статической электропроводности сплава при учете только упругого рассеяния воспользуемся формулой Кубо–Гринвуда [20]

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= -\frac{e^2 \hbar}{2\pi N \nu \Omega_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) \\ &\times \text{Sp} \left[ v_{\alpha} (G(E^+) - G(E^-)) v_{\beta} (G(E^+) - G(E^-)) \right], \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$G(E^{\pm}) \equiv G(E \pm i\delta) = (E^{\pm} - H)^{-1}$$

— запаздывающая (соответствующая знаку  $+$ ) и опережающая функции Грина системы,  $\delta \rightarrow +0$ ,  $f(E)$  — функция Ферми,  $v_{\alpha}$  — оператор  $\alpha$ -компоненты вектора скорости электрона,  $\alpha, \beta = x, y, z, e$  — заряд электрона,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $\Omega_0$  — атомный объем.

Используя свойство самоусредняемости тензора электропроводности и учитывая, что при нулевой температуре  $-\frac{\partial f(E)}{\partial E} = \delta(E - \mu)$  ( $\mu$  — уровень Ферми), перепишем выражение (25) в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi N \nu \Omega_0} \text{Sp} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{s s'} - 1) \\ &\times v_{\alpha} K(E^s, v_{\beta}, E^{s'}) |_{E=\mu}, \end{aligned} \quad (26)$$

где

$$K(E^s, v_{\beta}, E^{s'}) = \langle G(E^s) v_{\beta} (E^{s'}) \rangle.$$

Подставляя формулу (6) в (26), получим

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= -\frac{e^2 \hbar}{2\pi N \nu \Omega_0} \text{Sp} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{s s'} - 1) \left[ v_{\alpha} \tilde{K}(E^s, v_{\beta}, E^{s'}) \right. \\ &+ \tilde{K}(E^{s'}, v_{\alpha}, E^s) v_{\beta} \tilde{G}(E^{s'}) \langle T(E^{s'}) \rangle \\ &+ \tilde{K}(E^s, v_{\beta}, E^{s'}) v_{\alpha} \tilde{G}(E^s) \langle T(E^s) \rangle \\ &\left. + \tilde{K}(E^{s'}, v_{\alpha}, E^s) \langle T(E^s) \tilde{K}(E^s, v_{\beta}, E^{s'}) T(E^{s'}) \rangle \right]_{E=\mu}, \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$\tilde{K}(E^s, v_{\beta}, E^{s'}) = \tilde{G}(E^s) v_{\beta} \tilde{G}(E^{s'}).$$

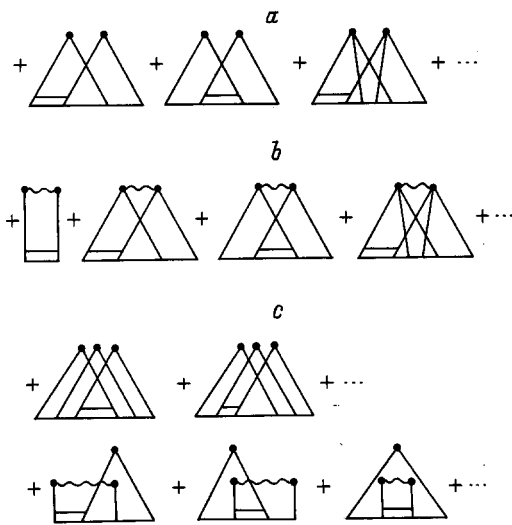


Рис. 2. Диаграммный ряд для конфигурационного среднего от произведения  $T$ -матриц.

Матрицы  $\tilde{K}_{0m}^{ij}(E^s, v_\beta, E^{s'})$  в выражении (27) вычисляются по формуле (см. (20))

$$\begin{aligned}
 & (\tilde{K}_{0m}^{ij})^{\gamma_1 \gamma_2}(E^s, v_\beta, E^{s'}) \\
 &= N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \tilde{G}_{\mathbf{k}}(E^s) v_{\beta \mathbf{k}} \tilde{G}_{\mathbf{k}}(E^{s'}) \right]^{\gamma_1 \gamma_2 j} \\
 & \times \exp[i\mathbf{k}(\boldsymbol{\rho}_i - \mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_j)], \quad (28)
 \end{aligned}$$

где оператор скорости электрона  $v_{\beta \mathbf{k}}$  определяется выражением [18,19]

$$v_{\beta \mathbf{k} \mathbf{k}'}^{\gamma_1 i_1 \gamma_2 i_2} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{\mathbf{k}}^{\gamma_1 i_1 \gamma_2 i_2}}{\partial k_\beta} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}.$$

Тензор электропроводности сплава можно вычислить, если воспользоваться изложенным выше кластерным разложением для  $T$ -матрицы рассеяния и провести в выражении (27) конфигурационное усреднение в соответствии с формулами (14)–(16), (19). В пренебрежении вкладом процессов рассеяния на кластерах из трех и более атомов следует подставить выражение (13) для  $T$ -матрицы в формулу (27) и сохранить в последней только суммы по одному ( $i_1 n_1$ ) и двум индексам ( $i_1 n_1$ ), ( $i_2 n_2$ )  $\neq$  ( $i_1 n_1$ ).

Конфигурационное среднее от произведения  $T$ -матриц  $\langle T(E^s) \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) T(E^{s'}) \rangle$  в выражении (27) для тензора электропроводности, так же как и рассмотренное выше конфигурационное среднее от  $T$ -матрицы  $\langle T(E) \rangle$ , можно представить в виде диаграмм (рис. 2), принцип построения которых следует из формул (9), (10), (14)–(16). Диаграммы (рис. 2, *a, b*) описывают вклады в электропроводность процессов рассеяния на кластерах из одного и двух атомов. Диаграммы, показанные на рис. 2, *a*, изображают вклады

процессов рассеяния без учета статистических межатомных корреляций. Диаграммы, приведенные на рис. 2, *b*, описывают члены, обусловленные парными межатомными корреляциями. Диаграммы, представленные на рис. 2, *c*, соответствуют рассеянию на кластерах из трех атомов. Двойная горизонтальная линия изображает оператор  $\tilde{K}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2}(E^s, v_\beta, E^{s'})$ . Остальные обозначения на рис. 2 совпадают с обозначениями на рис. 1. Двойная горизонтальная линия делит диаграмму на две части. Величины, описываемые левой частью диаграммы, соответствуют значению энергии  $E^s$ , правой частью —  $E^{s'}$ . На рис. 2 отсутствуют диаграммы, содержащие точки с одной выходящей линией. В силу условия (16) эти диаграммы не вносят вклада в электропроводность сплава. На рис. 2 отсутствуют также диаграммы с одинаковыми внешними индексами точек или одинаковыми внутренними индексами точек на краях двойной горизонтальной линии. Вклады этих диаграмм в электропроводность сплава (27) пропорциональны  $\tilde{K}_{00}^{ii}(E^{s'}, v_\alpha, E^s)$ . Для кристаллов кубической симметрии выполняется условие  $\tilde{K}_{00}^{ii}(E^{s'}, v_\alpha, E^s) = 0$  (см., например, [18,19]). В силу этого вклады указанных диаграмм в электропроводность обращаются в нуль. В приближении диагонального беспорядка диаграммы, приведенные на рис. 2, соответствуют всем возможным диаграммам, представленным на рис. 1, с различными внешними индексами узлов ( $in$ ), ( $jm$ ), в которых одна из горизонтальных линий ( $\tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2}(E)$ ) заменена на двойную горизонтальную линию ( $\tilde{K}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2}(E^s, v_\beta, E^{s'})$ ). В пренебрежении вкладом процессов рассеяния на кластерах из трех и более атомов выражение  $\langle T(E^s) \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) T(E^{s'}) \rangle$  (диаграммы, показанные на рис. 2, *a, b*) с учетом соотношений (19) сводится к точно суммируемому ряду геометрической прогрессии. Этот же результат дает усреднение выражения  $\langle T(E^s) \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) T(E^{s'}) \rangle$  по формулам (13)–(15), (19).

Таким образом, в пренебрежении вкладом процессов рассеяния на кластерах из трех и более атомов получим

$$\begin{aligned}
 & \langle T(E^s) \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) T(E^{s'}) \rangle_{\mathbf{k}}^{i_1 i_2} \\
 &= \sum_{(i_2 m) \neq (i_1 0)} M_{i_1 0 i_2 m}^n(E^s, v_\beta, E^{s'}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_m + \boldsymbol{\rho}_{i_2} - \boldsymbol{\rho}_{i_1})}, \quad (29)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 M_{i_0 j m}^n(E^s, v_\beta, E^{s'}) &= (x_i x_j + \varepsilon_{0m}^{ij}) M_{i_0 j m}^{nAA}(E^s, v_\beta, E^{s'}) \\
 &+ (x_i y_j - \varepsilon_{0m}^{ij}) M_{i_0 j m}^{nAB}(E^s, v_\beta, E^{s'}) \\
 &+ (y_i x_j - \varepsilon_{0m}^{ij}) M_{i_0 j m}^{nBA}(E^s, v_\beta, E^{s'}) \\
 &+ (y_i y_j + \varepsilon_{0m}^{ij}) M_{i_0 j m}^{nBB}(E^s, v_\beta, E^{s'}),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_{i0jm}^{n\lambda_1\lambda_2}(E^s, v_\beta, E^{s'}) &= p_i^{\lambda_1} p_j^{\lambda_2} (t_{i0}^B(E^s) - t_{i0}^A(E^s)) \\
 &\times \tilde{K}_{0m}^{ij}(E^s, v_\beta, E^{s'}) (t_{i0}^B(E^{s'}) - t_{i-0}^A(E^{s'})) \\
 &+ p_i^{\lambda_1} (t_{i0}^B(E^s) - t_{i0}^A(E^s)) \tilde{K}_{0m}^{ij}(E^s, v_\beta, E^{s'}) T_{jm0}^{d\lambda_2\lambda_1}(E^{s'}) \\
 &+ \left[ T_{i0jm}^{d\lambda_1\lambda_2}(E^s) \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) \right. \\
 &+ \left. T_{i0jm}^{n\lambda_1\lambda_2}(E^s) \tilde{K}_{mm}^{jj}(E^s, v_\beta, E^{s'}) \right] \\
 &\times \left[ p_j^{\lambda_2} (t_{j0}^B(E^{s'}) - t_{j0}^A(E^{s'})) + T_{jmi0}^{d\lambda_2\lambda_1}(E^{s'}) \right] \\
 &+ T_{i0jm}^{n\lambda_1\lambda_2}(E^s) \tilde{K}_{m0}^{ji}(E^s, v_\beta, E^{s'}) T_{i0jm}^{n\lambda_1\lambda_2}(E^{s'}), \\
 T_{i0jm}^{d\lambda_1\lambda_2} &= (p_i^{\lambda_1})^2 p_j^{\lambda_2} (I - p_i^{\lambda_1} p_j^{\lambda_2} a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji})^{-1} a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} (t_{i0}^B - t_{i0}^A), \\
 T_{jmi0}^{n\lambda_2\lambda_1} &= p_i^{\lambda_1} p_j^{\lambda_2} (I - p_i^{\lambda_1} p_j^{\lambda_2} a_{m0}^{ji} a_{0m}^{ij})^{-1} a_{m0}^{ji} (t_{i0}^B - t_{i0}^A), \\
 \lambda_1 \lambda_2 &= A, B, \quad p_j^A = -y_j, \quad p_i^B = x_i. \quad (30)
 \end{aligned}$$

Величины, стоящие в выражениях (29), (30), являются матрицами по отношению к индексам энергетических зон  $\gamma_1, \gamma_2$ .

Уровень Ферми  $\mu$  в выражении для электропроводности (27) определяется уравнением

$$xZ^A + yZ^B = \int_{-\infty}^{\mu} g(E) dE, \quad (31)$$

где  $Z^A, Z^B$  — число электронов на атом в рассматриваемых энергетических зонах компонентов  $A, B$  сплава.

Итак, выражение для электропроводности (27) имеет следующий окончательный вид:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\alpha\beta} &= -\frac{e^2 \hbar}{2\pi\nu\Omega_0} \text{Sp} \sum_i \sum_{s,s'=+,-} (2\delta_{s,s'} - 1) \\
 &\times \left\{ \left[ v_\alpha \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) \right]_{00}^{ii} \right. \\
 &+ \sum_{(jm) \neq (i0)} \left[ \tilde{K}(E^s, v_\alpha, E^{s'}) v_\beta \tilde{G}(E^{s'}) \right]_{00}^{ii} T_{i0jm}^d(E^{s'}) \\
 &+ \left[ \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) v_\alpha \tilde{G}(E^s) \right]_{00}^{ii} T_{i0jm}^d(E^s) \\
 &+ \left[ \tilde{K}(E^s, v_\alpha, E^{s'}) v_\beta \tilde{G}(E^{s'}) \right]_{0m}^{ij} T_{jmi0}^n(E^{s'}) \\
 &+ \left[ \tilde{K}(E^s, v_\beta, E^{s'}) v_\alpha \tilde{G}(E^s) \right]_{0m}^{ij} T_{jmi0}^n(E^s) \\
 &+ \left. \tilde{K}_{0m}^{ij}(E^{s'}, v_\alpha, E^s) M_{jmi0}^n(E^s, v_\beta, E^{s'}) \right\}_{E=\mu}, \quad (32)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 T_{i0jm}^d &= (A_{0m}^{ij})^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_{m0}^{ij} a_{m0}^{ji} + \varepsilon_{0m}^{ij}) \\
 &\times \left[ x_i - y_i + x_i y_i (x_j - y_j) a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} \right] a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} (t_{i0}^B - t_{i0}^A), \\
 T_{i0jm}^n &= (A_{0m}^{ij})^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji} + \varepsilon_{0m}^{ij}) \\
 &\times \left[ 1 - x_i x_j y_i y_j (a_{0m}^{ij} a_{m0}^{ji})^2 \right] a_{0m}^{ij} (t_{j0}^B - t_{j0}^A),
 \end{aligned}$$

а величины  $M_{jmi0}^n(E^s, v_\beta, E^{s'})$  определяются формулой (30).

### 3. Малый параметр

В выражении (21) для усредненной  $T$ -матрицы и в выражениях (27), (29) для тензора электропроводности сплава не учтены вклады процессов рассеяния на кластерах из трех и более атомов. Относительные величины неучтенных вкладов, рассчитанные по первым главным диаграммам, показанным на рис. 1, с и 2, с, оцениваются параметрами

$$\begin{aligned}
 p_{0m}^{\gamma ij} &= p_{0m}^{(1)\gamma ij} \left[ 1 + \sum_{\gamma_1 \neq \gamma} (V_{i0}^{B\gamma_1\gamma_1} - V_{i0}^{A\gamma_1\gamma_1}) \right. \\
 &\times \left. (V_{i0}^{B\gamma_1\gamma} - V_{i0}^{A\gamma_1\gamma}) (V_{i0}^{B\gamma\gamma} - V_{i0}^{A\gamma\gamma})^{-2} \right], \quad (33)
 \end{aligned}$$

Рассмотренное выше кластерное разложение для усредненной функции Грина системы справедливо при условии малости величин  $p_{0m}^{\gamma ij}$  (33), которые играют роль малых параметров теории. Малыми параметрами теории являются также параметры межатомных корреляций  $\varepsilon_{0m}^{ij}$ . Величины  $p_{0m}^{\gamma ij}$  являются малыми при условии малости параметров  $p_{0m}^{(1)\gamma ij}$  однозонной модели [17,18] и не слишком больших значений параметров гибридизации

$$(V_{i0}^{B\gamma\gamma} - V_{i0}^{A\gamma\gamma}) (V_{i0}^{B\gamma\gamma} - V_{i0}^{A\gamma\gamma})^{-1} < 1.$$

Как было сказано раньше, параметры  $p_{0m}^{(1)\gamma ij}$  могут быть малыми в широкой области изменения характеристик сплава (включая концентрацию компонентов), за исключением узкого интервала значений энергии на краю зоны [17,18].

### 4. Числовые результаты

На рис. 3, 4 представлены результаты расчета плотности электронных состояний и электропроводности бинарных неупорядоченных ( $\eta = 0$ ) сплавов замещения с ОЦК-решеткой ( $\nu_1 = \nu_2 = 1$ ), выполненные в многозонной  $s$ - $d$ -модели в приближении диагонального беспорядка по формулам (23), (24), (31), (32). Индекс энергетической зоны  $\gamma$  в многозонной  $s$ - $d$ -модели для кристаллов кубической симметрии

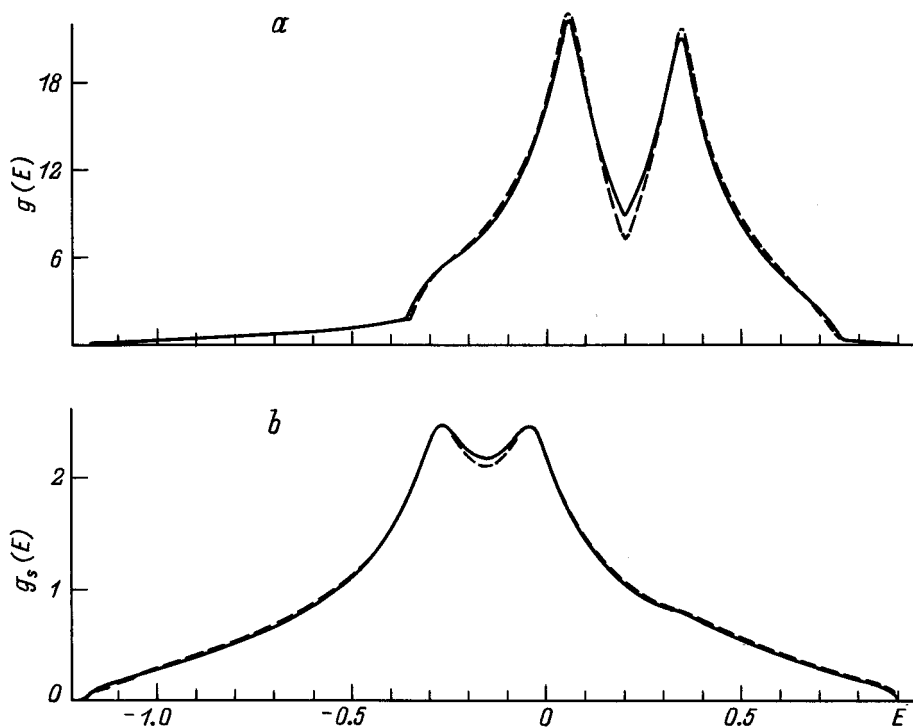


Рис. 3. Энергетическая зависимость плотности электронных состояний неупорядоченных сплавов.

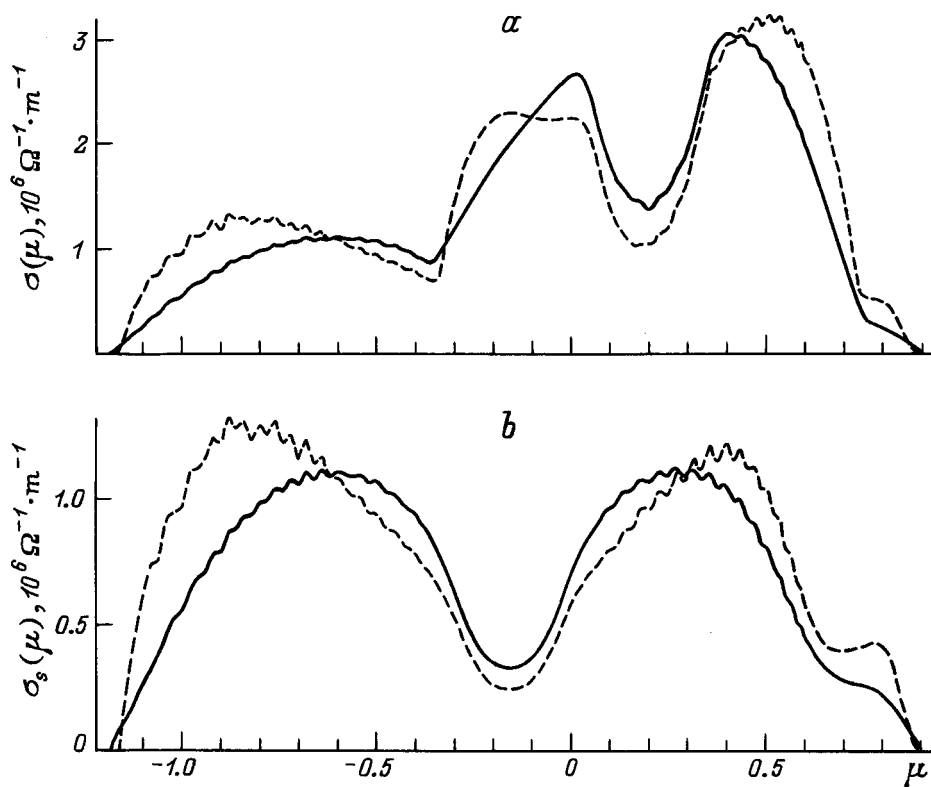


Рис. 4. Зависимость электропроводности неупорядоченных сплавов от положения уровня Ферми.

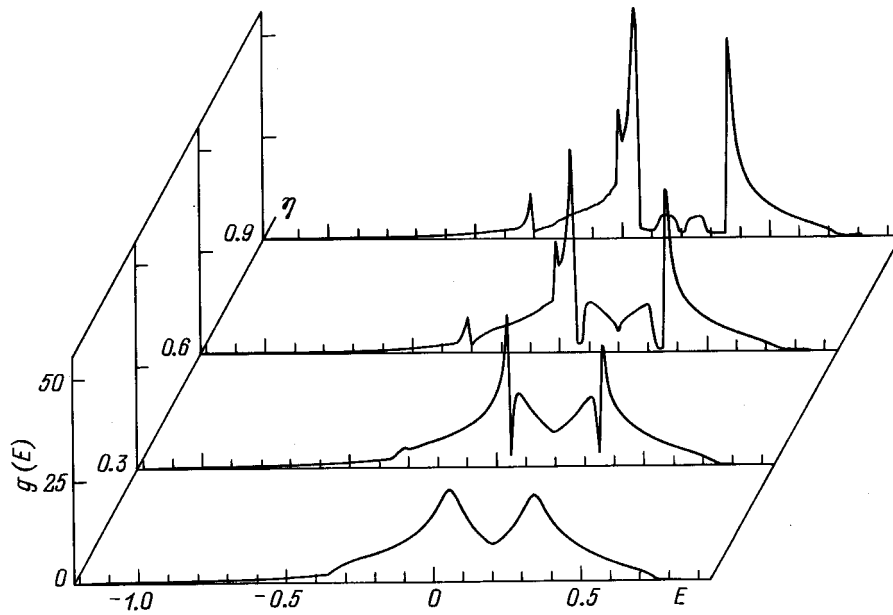


Рис. 5. Энергетическая зависимость плотности электронных состояний упорядочивающихся сплавов для различных значений параметра дальнего порядка  $\eta$  ( $\varepsilon_{00}^{12} = 0$ ).

принимает значения  $\gamma = (s, t, e)$ , где индекс  $s$  обозначает состояние  $s$ -зоны, а индексы  $t, e$  — соответственно состояния с трех- и двухкратно вырожденными значениями энергии  $d$ -зоны [1]. Энергетический спектр электронов чистого кристалла задавался в виде

$$h_{\mathbf{k}}^{\gamma_1 i \gamma_2 j} = h_{\mathbf{k}}^{\gamma_1 i j} \delta_{\gamma_1 \gamma_2},$$

$$h_{\mathbf{k}}^{\gamma 12} = h_{\mathbf{k}}^{\gamma 21} = 8h_{00}^{\gamma 12} \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2},$$

$$h_{\mathbf{k}}^{\gamma 11} = h_{\mathbf{k}}^{\gamma 22} = 0,$$

где  $h_{00}^{\gamma 12}$  — интеграл перескока для ближайших узлов,  $a$  — постоянная решетки.

Энергия измерялась в единицах полуширины  $s$ -зоны чистого металла  $w^s = 8|h_{00}^{s12}| = 10^{-18}$  J. Полуширина  $d$ -зоны  $w^d = 0.5$ ,  $V^{Bss} = 0$ ,  $V^{Att} = V^{Aee} = 0.35$ ,  $V^{A,Bte} = V^{A,Bet} = 0$ ,  $V^{Ast} = V^{Ase} = 0.03$ ,  $V^{Bss} - V^{Ass} = V^{Btt} - V^{Aee} = V^{Bee} - V^{Aee} = -0.3$ ,  $V^{Bst} - V^{Ast} = V^{Bse} - V^{Ase} = -0.02$ . Концентрация сплавов  $y = 0.5$ . Постоянная решетки  $a = 3.5 \cdot 10^{-10}$  м.

На рис. 3, а представлена энергетическая зависимость плотности электронных состояний  $g(E)$  полностью разупорядоченного сплава (сплошная кривая) и сплава с ближним порядком (параметр парных межатомных корреляций для первой координационной сферы  $\varepsilon_{00}^{12} = -0.05$ ). Для сравнения на рис. 3, б приведена аналогичная зависимость парциальной плотности  $s$ -состояний  $g_s(E)$  указанного сплава. На рис. 4, а изображены значения электропроводности  $\sigma(\mu)$  в зависимости от положения уровня Ферми  $\mu$  в энергетическом спектре сплавов с различной электронной

концентрацией. Сплошная кривая описывает разупорядоченные сплавы, штриховая — сплавы с ближним порядком ( $\varepsilon_{00}^{12} = -0.05$ ). Для сравнения на рис. 4, б приведены аналогичные значения вклада в электропроводность  $s$ -состояний  $\sigma_s(\mu)$  этих сплавов.

При ближнем упорядочении сплава на кривых энергетической зависимости парциальных плотностей электронных состояний возникают характерные провалы (рис. 3). Как видно на рис. 5, где представлена плотность электронных состояний  $g(E)$  упорядочивающегося сплава для различных значений параметра дальнего порядка  $\eta$ , при установлении дальнего порядка в области указанных провалов, положения которых в общем случае не совпадают, образуются две энергетические квазищели.

Характер изменения электропроводности сплава при ближнем упорядочении (рис. 4) зависит от положения уровня Ферми по отношению к указанным провалам. В случае когда уровень Ферми находится вне области провалов, электропроводность при упорядочении сплавов увеличивается. Когда уровень Ферми попадает в область одного из провалов, имеет место аномальное изменение электропроводности: при ближнем упорядочении электропроводность уменьшается. Указанные аномалии в поведении электропроводности при упорядочении сплава, связанные с вкладом в электропроводность изменения энергетического спектра электронов при неборновском характере рассеяния, были ранее детально исследованы в однозонной модели (см., например, [16,18,21,22]). Однако в соответствии с изложенным выше в реальной ситуации в энергетическом спектре электронов при



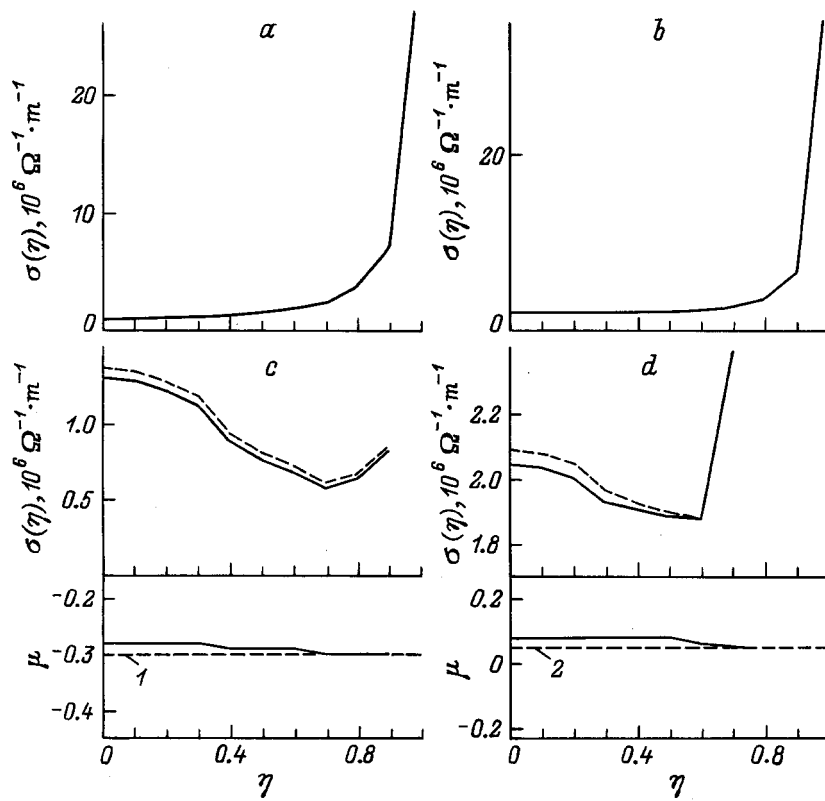


Рис. 6. Зависимость электропроводности сплавов и положения уровня Ферми (нижняя часть c, d от параметра дальнего порядка при  $Z = 0.36$  (a), 1.67 (b), 0.83 (c), 5.01 (d). 1 — левый край щели в s-зоне, 2 — то же в d-зоне.

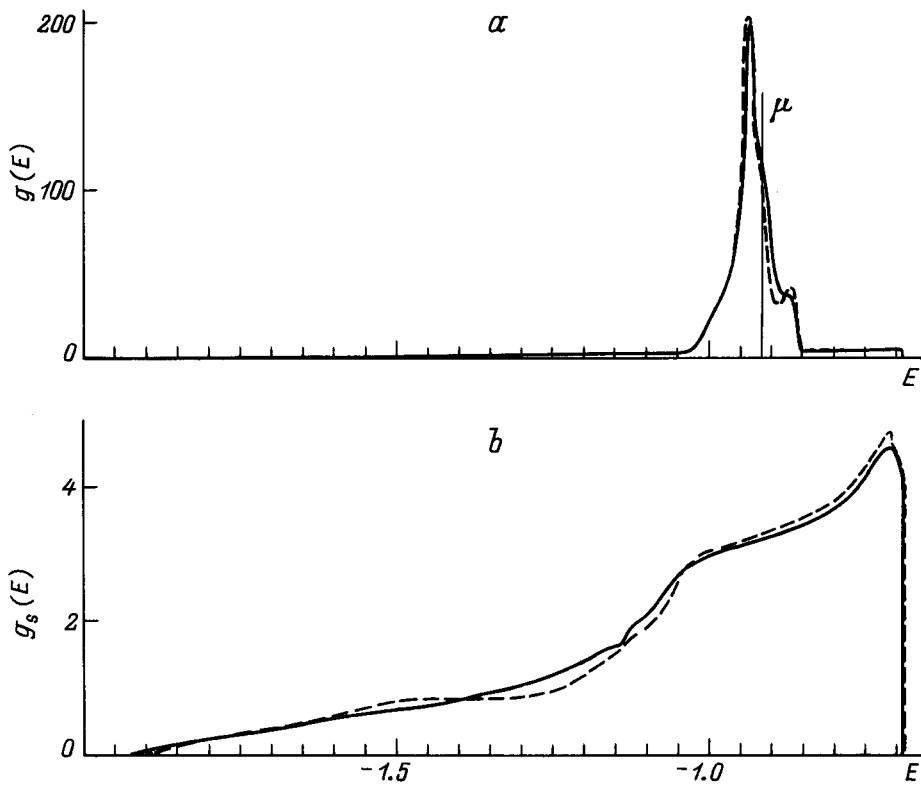


Рис. 7. Энергетическая зависимость плотности электронных состояний сплава Ni-Cr.

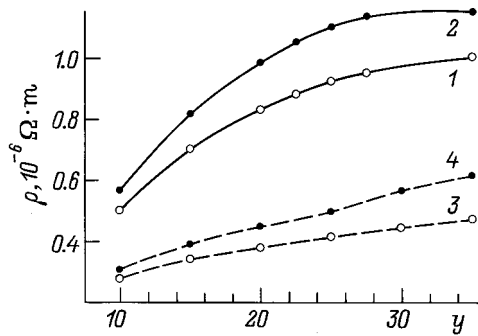


Рис. 8. Концентрационная зависимость остаточного удельного электросопротивления  $\rho$  сплавов Ni-Cr.

упорядочении сплавов возможно возникновение не одной щели, а нескольких квазищелей.

На рис. 6 представлена зависимость электропроводности от параметра дальнего порядка  $\eta$  ( $\varepsilon_{00}^{12} = 0$ ) при различных значениях среднего числа электронов на атом  $Z = xZ^A + yZ^B$  (см. (31)), штриховые кривые представляют расчеты, проведенные в ПКП. В случае когда уровень Ферми находится вне области квазищелей, электропроводность с увеличением степени дальнего порядка возрастает (рис. 6, *a, b*). Когда уровень Ферми попадает в области одного из провалов, имеет место anomalous изменение электропроводности: при упорядочении электропроводность уменьшается (рис. 6, *c, d*). Положение уровня Ферми  $\mu$  зависит от параметра дальнего порядка  $\eta$ , и при некотором значении  $\eta$  уровень Ферми выходит за пределы соответствующих квазищелей (нижняя часть рис. 6, *c, d*). Этим объясняется немонотонное поведение электропроводности при упорядочении в данных случаях (рис. 6, *c, d*).

Предсказанные выше эффекты в поведении электропроводности сплавов при упорядочении дают возможность объяснить природу anomalous изменения электронных характеристик сплавов при структурно-фазовых превращениях, в частности сплавы Ni-Cr [23]. Далее представлены результаты расчетов плотности электронных состояний и электропроводности сплавов Ni-Cr, проведенных в многозонной *s-d*-модели в приближении диагонального беспорядка по формулам (23), (24), (31), (32).

На рис. 7, *a* представлены результаты расчета плотности электронных состояний  $g(E)$  сплава Ni-Cr (ГЦК-решетка) стехиометрического состава. Сплошной кривой представлен полностью разупорядоченный сплав, штриховой — сплав с ближним порядком (параметр парных межатомных корреляций для первой координационной сферы  $\varepsilon_{00}^{12} = -0.056$ ). Для сравнения на рис. 7, *b* приведена аналогичная зависимость парциальной плотности *s*-состояний  $g_s(E)$  указанного сплава. Энергия измерялась в единицах полуширины *s*-зоны чистого никеля  $w^s = 13.19 \cdot 10^{-18}$  J.

Матричные элементы гамильтониана сплава были получены на основе волновых функций и атомных потенциалов изолированных атомов, рассчитанных в  $X_\alpha$ -приближении для обменно-корреляционного потенциала. Постоянная решетки  $a = 2.79 \cdot 10^{-10}$  m.

Как следует из расчетов, уровень Ферми в сплавах Ni-Cr попадает в область провала на плотности электронных состояний, возникающего при ближнем упорядочении. В соответствии с изложенным выше, при возрастании степени ближнего порядка в электропроводности указанных сплавов наблюдается anomalous поведение. На рис. 8 представлена концентрационная зависимость остаточного электросопротивления  $\rho(y)$  ( $\rho = \sigma^{-1}$ ) сплавов Ni-Cr. Видно, что остаточное электросопротивление упорядоченного сплава (4) больше электросопротивления разупорядоченного сплава (3). Значения параметров ближнего порядка для первой координационной сферы Ni-Cr взяты из работы [24]. На рис. 8 приведены также экспериментальные концентрационные зависимости остаточного удельного электросопротивления упорядоченного (кривая 2) разупорядоченного (кривая 1) сплава Ni-Cr. Упорядочение сплавов достигалось путем отжига при  $900^\circ$  C с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры [23]. Представленные на рис. 8 результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными. Для лучшего согласия с экспериментом в дальнейшем, по-видимому, следует учитывать и недиагональный беспорядок.

Работа выполнена при поддержке ГКНТ.

## Список литературы

- [1] Г. Эренрейх, Л. Шварц. Электронная структура сплавов. М. (1979). 200 с.
- [2] R.J. Elliot, J.A. Krumhansl, P.L. Leath. Rev. Mod. Phys. **46**, 3, 465 (1974); Р. Эллиот, Дж. Крамхансл, П. Лис. Теория и свойства неупорядоченных материалов / Пер. с англ. под ред. В.Л. Бонч-Бруевича. М. (1977). С. 11.
- [3] P. Mills, P. Ratanavararaksa. Phys. Rev. **B18**, 10, 5291 (1978).
- [4] A. Mookerjee. J. Phys. **C6**, 10, L205 (1973).
- [5] S.S.A. Razeen, A. Mookerjee, R. Prasad. J. Phys.: Cond. Matter. **3**, 19, 3301 (1991).
- [6] H.W. Diehl, P.L. Leath. Phys. Rev. **B19**, 2, 587 (1979).
- [7] T. Kaplan, L.J. Gray. Phys. Rev. **B15**, 6, 3260 (1977).
- [8] L.J. Gray, T. Kaplan. Phys. Rev. **B24**, 4, 1872 (1981).
- [9] V. Kumar, A. Mookerjee, V.K. Srivastava. J. Phys. **C15**, 9, 1939 (1982).
- [10] М.П. Фатеев. ТМФ **90**, 1, 128 (1992).
- [11] А.В. Ведяев. ТМФ **31**, 3, 392 (1977).
- [12] А.В. Ведяев, А.Б. Грановский, Е.И. Кондорский, О.А. Котельников. ФТТ **20**, 1, 166 (1978).
- [13] А.В. Ведяев, А.Б. Грановский, Е.И. Кондорский, О.А. Котельников. ФТТ **21**, 4, 961 (1979).

- [14] В.В. Гаркуша, В.Ф. Лось, С.П. Репецкий. ТМФ **84**, 1, 91 (1990).
- [15] N.P. Kulish, P.V. Petrenko, S.P. Repetsky, T.D. Shatnii. Phys. Stat. Sol. (b) **165**, 2, 143 (1991).
- [16] В.Ф. Лось, С.П. Репецкий. ТМФ **91**, 2, 279 (1992).
- [17] В.Ф. Лось, А.В. Лось, С.П. Репецкий. ТМФ **97**, 2, 304 (1993).
- [18] V.F.Los', S.P. Repetsky. J. Phys. Cond. Matter. **6**, 1707 (1994).
- [19] В.Ф. Лось, С.П. Репецкий. Методы теории неупорядоченных систем. Киев. (1995). 176 с.
- [20] V. Velicky. Phys. Rev. **184**, 3, 614 (1969).
- [21] В.Ф. Лось, С.П. Репецкий, К.П. Годлевский. Металлофизика и новейшие технологии **16**, 10, 3 (1994).
- [22] В.Ф. Лось, С.П. Репецкий, К.П. Годлевский. ФТТ **36**, 1, 194 (1994).
- [23] Ю.Е. Грабовский, В.М. Давидовский, Н.П. Кулиш, Н.А. Мельникова и др. Изв. АН СССР. Металлы **4**, 176 (1987).
- [24] Н.А. Мельникова, П.В. Петренко, С.П. Репецкий, В.А. Шевченко. ФММ **42**, 1, 205 (1976).