объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

3628/83

18/7-83

Р17-83-260

Ф.Кристоф, А.Л.Кузёмский

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Направлено в журнал "physica status solidi"

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование электросопротивления разупорядоченных сплавов переходных металлов и, в особенности, его температурной зависимости имеет большое практическое и теоретическое значение. Значительно стимулировала интерес к этой проблеме работа [1], в которой экспериментально обнаружено, что температурный коэффициент сопротивления металлических сплавов может становиться отрицательным, если их остаточное сопротивление превысит некоторое данное критическое значение. В ряде работ было указано, что для объяснения этого явления необходимо выйти за пределы приближения слабого рассеяния и учесть интерференцию потенциального рассеяния на статистических дефектах и электрон-фононное рассеяние [2,3].

В приближении слабого рассеяния вклады от рассеяния электронов на примесях и фононах входят в полное сопротивление аддитивным образом, без каких-либо интерференционных членов /правило Маттиссена/. Случай сильного рассеяния впервые рассмотрен Велицким [4] в рамках одноузельного приближения когерентного потенциала на основе формулы Кубо-Гринвуда. В целом ряде работ [5-12] результаты Велицкого были распространены для более общих случаев и моделей.

Первая попытка включить электрон-фононное рассеяние в расчеты сопротивления по методу приближения когерентного потенциала предпринята в работе [13]. В этой работе предложена модель, в которой только электроны описывались в приближении когерентного потенциала, а фононы описывались феноменологически. Электрон-фононное взаимодействие представлялось в виде локального оператора. Модель [13] использовалась также в работах [14-16]. Недавно эта проблема изучалась в работе [17], в которой электрон-фононное взаимодействие описывалось гамильтонианом Фрелиха для чистого кристалла, а интерференционные поправки вычислялись только в пределе слабого рассеяния.

Целью настоящей работы является построение теории электропроводности разупорядоченных сплавов переходных металлов с учетом электрон-фононного рассеяния. Фононная подсистема описывается микроскопически. Электрон-фононный гамильтониан записывается в виде, предложенном в работе Барисича-Лаббе-Фриделя [18] для реалистической модели сильно связанных электронов переходного металла. Ранее, в работе [19], модель БЛФ была использована для вычисления вклада электрон-фононного рассеяния в электросопротивление переходного металла. Зависимость электросопротивления переходного металла от различных схем описания электронных со-

Объединенный институт ядерных исследований БИБЛИОТЕКА

стояний и матричного элемента электрон-фононного взаимодействия были недавно проанализированы в работах [20,21].

В работе [22] была развита последовательная микроскопическая теория электрон-фононного взаимодействия в разупорядоченных сплавах переходных металлов. Однако разработанная в [22] методика вычисления одночастичных функций Грина электронов и фононов в сплаве не может быть прямо применена для вычисления двухчастичных функций Грина, которые необходимы для расчета электропроводности на основе формулы Кубо. Поэтому для упрощения расчетов в настоящей работе мы рассмотрим наиболее простой способ учета фононов, а именно - будем описывать фононы без учета беспорядка. Тем не менее, даже при таком упрощении в нашей работе, в отличие от работы [13], фононная подсистема описывается микроскопически. При этом фононы относятся к соответствующему виртуальному кристаллу. Кроме того, в отличие от предыдущих работ, электрон-фононное взаимодействие имеет нелокальный характер. Поэтому предлагаемый подход представляется разумным приближением для описания влияния электрон-фононного взаимодействия на электропроводность /ср. с работой [23] /.

2. МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ

Для заданной конфигурации атомов бинарного разупорядоченного сплава замещения гамильтониан электрон-ионной системы запишем в виде

$$H = H_e^{\circ} + H_p + H_{ep}\,, \qquad /1/$$

где

$$H_e^{\circ} = \sum_{i\sigma} \epsilon_i a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} \qquad /2/$$

- одночастичный гамильтониан электронов. Поскольку в настоящей работе мы главным образом интересуемся влиянием электрон-фононного взаимодействия, то электронную /хаббардовскую/ корреляцию будем учитывать в приближении Хартри-Фока: $\epsilon_i = \epsilon_i^{\circ} + U_i < n_{i-\sigma}>$.

Как уже говорилось выше, для простоты в настоящей работе ионную подсистему сплава будем описывать обычным фононным гамильтонианом

$$H_p = \sum_{q\nu} \omega_{q\nu}(b_{q\nu}^{+} b_{q\nu} + \frac{1}{2}). \qquad /3/$$

Электрон-фононное взаимодействие описываем оператором [18,24]

$$H_{ep} = \sum_{ij} \sum_{\sigma\alpha} T_{ij}^{\alpha}(u_i^{\alpha} - u_j^{\alpha}) a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma}\,. \qquad /4/$$

В представлении фононных операторов $b_{q\nu}^{+}, b_{q\nu}$ /4/ перепишется в виде

$$H_{ep} = \sum_{q\nu\sigma} \sum_{i \neq j} A_{q\nu}(ij)(b_{q\nu} + b_{-q\nu}^{+}) a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma}\,, \qquad /5/$$

где

$$A_{q\nu}(ij) = \frac{q_0}{\sqrt{2<M>N\omega_{q\nu}}}\, t_{ij} \frac{(\vec{R}_j - \vec{R}_i)}{|\vec{R}_j - \vec{R}_i|} \vec{e}_{q\nu} (e^{i\vec{q}\vec{R}_i} - e^{i\vec{q}\vec{R}_j}). \qquad /6/$$

Здесь $\omega_{q\nu}$ - акустические фононные частоты, $<M>$ - средняя ионная масса, $\vec{e}_{q\nu}$ - векторы поляризации, q_0 - слейтеровский коэффициент, связанный с экспоненциальным убыванием радиальной части волновой функции сильносвязанного электрона. Удобно переписать /5/ в следующей форме:

$$H_{ep} = \sum_{\vec{q}} \sum_{ij} \lambda_q (j-i) e^{i\vec{q}\vec{R}_i} (b_q + b_{-q}^{+}) a_i^{+} a_j\,, \qquad /7/$$

где опущены спиновые и поляризационные индексы σ и ν.

Электропроводность системы определяется по формуле Кубо

$$\sigma(i\eta) = -<<\vec{J}\,|\,\vec{P}>>_{i\eta} \quad (\eta \to 0^{+}), \qquad /8/$$

где $\vec{P} = e\sum_i \vec{R}_i n_i$ - оператор дипольного момента системы, $\vec{J} = \dot{\vec{P}}$ - оператор тока,

$$\vec{J} = \dot{\vec{P}} = -ie\sum_{ij} (\vec{R}_i - \vec{R}_j) t_{ij} a_i^{+} a_j\,. \qquad /9/$$

Величина $<<A(t)\,|B>> = -i\theta(t)<[A(t),B]_{-}>$ - двухвременная температурная функция Грина. С учетом /9/ уравнение /8/ примет вид

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{ie^2}{\Omega} \sum_{ij} \sum_{\ell} (R_i - R_j)^{\alpha} R_{\ell}^{\beta} t_{ij} << a_i^{+} a_j\,|\,a_{\ell}^{+} a_{\ell} >>_{i\eta}\,, \qquad /10/$$

где Ω - объем системы. Подчеркнем, что уравнение /10/ записано для данной конфигурации атомов сплава. В дальнейшем ограничимся рассмотрением только диагонального беспорядка, следовательно,

$$t_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \exp[i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)]. \qquad /11/$$

3. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА

Для того, чтобы вычислить функцию Грина $G_{ij,\ell m} = << a_i^{+} a_j\,|\,a_{\ell}^{+} a_{\ell} >>$, запишем для нее уравнение движения. Дифференцируя по первому времени, получим

$$\sum_{nr} H_{ij,rn}\, G_{nr,\ell m}(\omega) = \langle a_i^+ a_m\rangle \delta_{\ell j} - \langle a_\ell^+ a_j\rangle \delta_{mi} + \sum_{qn}[\lambda_q(j-n)\, e^{iqR_j} \langle\langle a_i^+ a_n (b_q + b_{-q}^+) | a_\ell^+ a_m\rangle\rangle - \lambda_q(n-i)\, e^{iqR_n}\langle\langle a_n^+ a_j (b_q+b_{-q}^+)|a_\ell^+ a_m\rangle\rangle], \qquad /12/$$

где

$$H_{ij,rn} = (\omega - \epsilon_n + \epsilon_r)\,\delta_{ni}\,\delta_{rj} - t_{jr}\,\delta_{ni} + t_{ni}\,\delta_{rj}\,. \qquad /13/$$

Определим функцию Грина нулевого порядка, которая подчиняется следующим уравнениям движения:

$$\sum_{nr} H_{ij,nr}\, G^0_{nr,\ell m} = \langle a_i^+ a_m\rangle\delta_{\ell j} - \langle a_\ell^+ a_j\rangle\delta_{mi}\,, \qquad /14а/$$

$$\sum_{nr} H_{rn,\ell m}\, G^0_{ij,nr} = \langle a_i^+ a_m\rangle\delta_{\ell j} - \langle a_\ell^+ a_j\rangle\delta_{mi}\,, \qquad /14б/$$

где уравнение /14б/ было получено дифференцированием по второму времени ФГ $G^0_{ij,nr}$. Используя /14/, можно показать, что

$$\sum_{nr}(\langle a_s^+ a_n\rangle\delta_{rt} - \langle a_r^+ a_t\rangle \delta_{sn})\, G_{nr,\ell m}(\omega) = \sum_{ij}(\langle a_i^+a_m\rangle\delta_{\ell j} - \langle a_\ell^+ a_j\rangle\delta_{mi})\, G^0_{st,ji} + \sum_{ijn}\sum_q[\lambda_q(j-n)\,e^{iqR_j}\langle\langle a_i^+a_n(b_q+b_{-q}^+)|a_\ell^+a_m\rangle\rangle - \lambda_q(n-i)\,e^{iqR_n}\langle\langle a_n^+ a_j(b_q+b^+_{-q})|a_\ell^+a_m\rangle\rangle]\,G^0_{st,ji}\,; \qquad /15/$$

функции Грина высшего порядка в правой части /15/ вычисляются аналогичным образом. Используя /14б/ и расцепление $\langle\langle a_n^+ a_r b_q^+ b_q|B\rangle\rangle \approx \nu_q \langle\langle a_n^+ a_r|B\rangle\rangle$, найдем, что

$$\sum_{rn}(\langle a_s^+a_n\rangle\delta_{rt} - \langle a_r^+ a_t\rangle\delta_{sn})\langle\langle a_n^+ a_r b_q|a_\ell^+ a_m\rangle\rangle = \omega_q\sum_{ij}\langle\langle a_i^+ a_j b_q|a_\ell^+ a_m\rangle\rangle G^0_{st,ji} - \sum_{ijn}(1+\nu_q)[\lambda_{-q}(j-n)\,e^{-iqR_j}G_{in,\ell m} - \lambda_{-q}(n-i)\,e^{-iqR_n}G_{nj,\ell m}]\,G^0_{st,ji} - \sum_{ij}\sum_{np}\lambda_{-q}(n-p)\,e^{-iqR_n}[\langle a_p a_i^+\rangle G_{nj,\ell m} - \langle a_p^+ a_j\rangle G_{ip,\ell m}]\,G^0_{st,ji} \qquad /16/$$

и подобное же уравнение для $\langle\langle a_n^+ a_r b^+_{-q}|a_\ell^+ a_m\rangle\rangle$. Здесь ν_q обозначает бозевскую функцию распределения фононов.

В уравнениях /14/-/16/ функции Грина G, G^0 и средние значения $\langle a_i^+ a_j\rangle$, которые выражаются через одночастичную ФГ, зависят от конфигурации атомов в сплаве. Следовательно, для получения наблюдаемых величин необходимо провести конфигурационное усреднение. Мы ограничимся простейшим способом, а именно будем считать, что при усреднении все произведения величин, зависящих от конфигурации, усредняются независимо, т.е. будем пренебрегать любыми вершинными /в смысле конфигурационного усреднения/ поправками

$$\overline{G\cdot G} \approx \overline{G}\cdot\overline{G}\,. \qquad /17/$$

С учетом /17/ введем по определению среднюю нулевую ФГ, для которой примем решение когерентного потенциала для двухчастичной ФГ [4,13]:

$$\overline{G^0_{ij,\ell m}}(\omega) = \frac{1}{N^2}\sum_{k_1,k_2} e^{ik_1(R_m-R_n)}\, e^{ik_2(R_j-R_\ell)}\, F_2(k_1,k_2)\,, \qquad /18/$$

где $F_2(k_1,k_2)$,

$$F_2(k_1,k_2) \approx i(\epsilon_{k_2}-\epsilon_{k_1})\int d\omega\, f'(\omega)\left[\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\omega-\Sigma(\omega)-\epsilon_{k_1}}\right\}\right]^2 \qquad /19/$$

для $|\epsilon_{k_1}-\epsilon_{k_2}| \ll |\Sigma(\epsilon_{k_1})|$

и

$$F_2(k_1,k_2) \approx \frac{f(\epsilon_{k_1}) - f(\epsilon_{k_2})}{\epsilon_{k_1}-\epsilon_{k_2}} \quad \text{для} \quad |\epsilon_{k_1}-\epsilon_{k_2}| \gg |\Sigma(\epsilon_{k_1})|. \qquad /20/$$

Здесь $\Sigma(\omega)$ - когерентный потенциал [4,13], а $f(\omega)$ - фермиевская функция распределения. Далее запишем одночастичное конфигурационное среднее $\langle a_s^+ a_n\rangle$

$$\overline{\langle a_s^+ a_n\rangle} = \sum_{\vec k} e^{ik(R_n-R_s)}\, F_1(\vec k)\,, \qquad /21/$$

где

$$F_1(k) = -\frac{1}{\pi}\int d\omega\, f(\omega)\, \mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\omega-\Sigma(\omega)-\epsilon_k}\right\}. \qquad /22/$$

После конфигурационного усреднения уравнения /15/ и /16/ могут быть разрешены с помощью преобразования Фурье. В итоге получим

$$\overline{G_{ij,\ell m}} = \frac{1}{N^2}\sum_{k_1k_2}\sum_{k_3k_4} e^{-ik_1R_i}\, e^{ik_2R_j}\, e^{-ik_3R_\ell}\, e^{ik_4R_m}\, G(k_1k_2;k_3k_4)\,, \qquad /23/$$

где

$$G(k_1k_2;k_3k_4) \equiv G(k_1k_2) = F_2(k_1k_2)\,\delta(k_4,k_1)\,\delta(k_3,k_2) -$$

$$-\frac{1}{N}\frac{F_2(k_1k_2)}{F_1(k_1)-F_1(k_2)}\times \tag{24}$$

$$\times\sum_q\Big[\frac{\lambda(q,k_2-q)\lambda(-q,k_2)(F_1(k_2-q)-1-\nu_q)G(k_1k_2)+\lambda(q,k_2-q)\lambda(-q,k_1)(F_1(k_1)+\nu_q)G(k_1-q,k_2-q)}{[F_1(k_1)-F_1(k_2-q)-\omega_qF_2(k_1,k_2-q)]\,F_2^{-1}(k_1,k_2-q)}+$$

$$+\frac{\lambda(q,k_1)\lambda(-q,k_2-q)(1+\nu_q-F_1(k_2))G(k_1-q,k_2-q)-\lambda(q,k_1)\lambda(-q,k_1-q)(F_1(k_1-q)+\nu_q)G(k_1,k_2)}{[F_1(k-q)-F_1(k_2)-\omega_qF_2(k_1-q,k_2)]\,F_2^{-1}(k_1-q,k_2)}\Big]$$

\- 2 слагаемых, в которых $\omega_q \to -\omega_q$ и $\nu_q \to (-1-\nu_q)$.

Здесь $\lambda(q,k) = \frac{1}{N}\sum_k e^{ik(R_i-R_j)}\lambda_q(i-j)$. Таким образом для функции Грина $G(k_1,k_2)$ получено интегральное уравнение /24/.

4. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО СПЛАВА

Конфигурационно-усредненная проводимость может быть, в принципе, получена на основе формулы /10/. Однако более удобно воспользоваться формулой Кубо, записанной уже в обратном пространстве [25]

$$\sigma = \frac{ie^2}{\Omega}\lim_{\vec k'\to 0}\sum_{\vec k}\frac{1}{k'^2}\Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec k}\vec k'\Big)\langle\langle a^+_{\vec k}a_{\vec k+\vec k'}\,|\,\rho_{-\vec k'}\rangle\rangle_{i\eta}\,, \tag{25}$$

где $\rho_{-\vec k'} = \sum_{\vec k} a^+_{\vec k}a_{\vec k-\vec k'}$.

Для того, чтобы найти ФГ $\langle\langle a^+_{\vec k}a_{\vec k+\vec k'}|\rho_{-\vec k'}\rangle\rangle$, можно воспользоваться интегральным уравнением /24/. В общем случае решение этого уравнения может быть найдено только численным образом. Однако в некоторых предельных случаях можно сделать некоторые оценки. Мы обсудим два таких случая. Во-первых, рассмотрим предел слабого рассеяния, когда беспорядок мал. Во-вторых, рассмотрим очень простую оценку температурного коэффициента проводимости для сильного потенциального рассеяния.

4.1. Предел слабого рассеяния

В пределе слабого рассеяния ФГ в приближении когерентного потенциала /19/ ведет себя как [4]:

$$F_2(k_1,k_2) = i(\varepsilon_{k_2}-\varepsilon_{k_1})f'_{k_1}\frac{1}{\Sigma(\varepsilon_{k_1})} \quad \text{для} \quad (\varepsilon_{k_2}-\varepsilon_{k_1}) \ll |\Sigma(\varepsilon_{k_1})|, \tag{26}$$

где $f'_k \equiv \frac{df}{d\varepsilon_k}$. В соответствии с /26/ для ФГ $G(k,k+k')$ решение будем искать в следующем приближенном виде /для статического предела/ /ср. с [25]/:

$$G(k,k+k') = \langle\langle a^+_{\vec k}a_{k+k'}\,|\,\rho_{-k}\rangle\rangle_{i\eta} = i\Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec k}\vec k'\Big)f'_k\frac{1}{\Sigma(\varepsilon_k)+\gamma(\varepsilon_k)}. \tag{27}$$

Здесь γ описывает вклад электрон-фононного рассеяния в когерентный потенциал /при условии, что его можно приближенно выделить/. Принимая во внимание, что в пределе слабого рассеяния $|\Sigma| \ll \omega_q$ и заменяя $F_2(k,k-q)$ в правой части /24/ приближенным выражением /20/, запишем интегральное уравнение /24/ при $k'\to 0$ в виде

$$if'_k\Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec k}\vec k'\Big)\frac{1}{\Sigma(\varepsilon_k)+\gamma(\varepsilon_k)} = if'_k\Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec k}\vec k'\Big)\frac{1}{\Sigma(\varepsilon_k)} -$$

$$-\frac{1}{\Sigma(\varepsilon_k)}\frac{1}{N}\sum_q\lambda(q,k-q)\lambda(-q,k)\Big[\frac{(f_{k-q}-1-\nu_q)f'_k\big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec k}\vec k'\big)(\Sigma(\varepsilon_k)+\gamma(\varepsilon_k))^{-1}}{\varepsilon_k-\varepsilon_{k-q}-\omega_q+i\eta}+$$

$$+\frac{(\nu_q+f_k)f'_{k_1-q}\big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial(\vec k_1-\vec q)}\vec k'\big)(\Sigma(\varepsilon_{k-q})+\gamma(\varepsilon_{k-q}))^{-1}}{\varepsilon_k-\varepsilon_{k-q}-\omega_q+i\eta}+ \tag{28}$$

$$+\frac{(1+\nu_q-f_k)f'_{k-q}\big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial(\vec k-\vec q)}\vec k'\big)(\Sigma(\varepsilon_{k-q})+\gamma(\varepsilon_{k-q}))^{-1}-(\nu_q+f_{k-q})f'_k\big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec k}\vec k'\big)(\Sigma(\varepsilon_k)+\gamma(\varepsilon_k))^{-1}}{\varepsilon_k-\varepsilon_{k-q}+\omega_q+i\eta}$$

\- 2 слагаемых, в которых $\omega_q \to -\omega_q$ и $\gamma_q \to (-1-\nu_q)$.

Если заменить в /28/ $\Sigma(\varepsilon_k)$ и $\gamma(\varepsilon_k)$ их значениями на уровне Ферми $\Sigma(\varepsilon_f)\equiv\Sigma$ и $\gamma(\varepsilon_f)\equiv\gamma$, то члены, пропорциональные Σ, взаимно сократятся, и мы получим

$$\gamma f'_k\Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec k}\vec k'\Big) = -\frac{\pi}{N}\sum_q\lambda(q,k-q)\lambda(-q,k)\;\times$$

$$\times \{[(f_k + \nu_q) f'_{k-q}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial(\vec{k}-\vec{q})}\vec{k}') -$$

$$-(1+\nu_q - f_{k-q}) f'_k (\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}}\vec{k}')]\,\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \omega_q) - \qquad /29/$$

$$-[(f_{k-q}+\nu_q) f'_k(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}}\vec{k}') -$$

$$-(1+\nu_q - f_k) f'_{k-q}(\frac{\partial \varepsilon}{\partial(\vec{k}-\vec{q})}\vec{k}')]\,\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} + \omega_q)\}.$$

Используя приближения $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{m^*}\vec{k}$, где $m^* = m^*(\varepsilon_f)$ и $\lambda(q, k-q)\lambda(-q,k) \approx \approx \lambda^2 q$, для малых q найдем из /29/

$$\gamma = \beta \frac{\Omega}{2\pi N} \frac{\lambda^2 m^*}{2(2m^* \varepsilon_f)^{3/2}} \int q^4 dq\, \omega_q \nu_q (1+\nu_q). \qquad /30/$$

Таким образом

$$\gamma \sim \begin{cases} T^5 \\ T \end{cases} \text{для } T \begin{matrix} \ll \\ \gg \end{matrix} \Theta_D, \qquad /31/$$

где Θ_D - температура Дебая.

Для бинарного сплава $A_c B_{1-c}$ с концентрациями компонент c_A и c_B и соответствующими энергиями атомов ϵ_A и ϵ_B, когерентный потенциал в пределе слабого рассеяния можно представить в виде/13/

$$\Sigma = c_A c_B (\epsilon_A - \epsilon_B)^2 N_0(\varepsilon_f), \qquad /32/$$

где $N(\varepsilon_f)$ -плотность состояний электронов на уровне Ферми. С учетом /27/ и /32/ проводимость /25/ примет вид

$$\sigma = -\frac{e^2}{3(2\pi)^3} \int d\vec{k} (\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}})^2 f'_{\vec{k}} \cdot \tau, \qquad /33/$$

где

$$\tau^{-1} = \Sigma + \gamma. \qquad /34/$$

Таким образом, полученное выражение для электропроводности содержит в качестве предельного случая температурное поведение Блоха-Грюнайдена, а также правила Матиссена и Нордгейма /см. уравнения /30/, /31//.

4.2. ТЕМПЕРАТУРНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ПРОВОДИМОСТИ ДЛЯ СИЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ

Для сильно разупорядоченного сплава разумно считать электрон-фононное взаимодействие как возмущение. При этом можно заменить ФГ $G(k,k')$ в правой части /24/ функциями Грина в приближении когерентного потенциала $F(k,k')$. Далее, для простоты будем учитывать в правой части /24/ только температурную зависимость от бозевских функций распределения ν_q, как это обычно делается в теории электропроводности металлов. Тогда функция Грина $\langle\langle a^+_k a_{k_1} | \rho_{k-k_1} \rangle\rangle$ запишется в виде $(\vec{k}_1 = \vec{k} + \vec{k}' \approx \vec{k})$

$$\langle\langle a^+_k a_{k_1} | \rho_{k-k_1} \rangle\rangle_{i\eta} = F_2(k,k_1)(1 - \frac{2}{F_1(k) - F_1(k_1)} \sum_q \lambda(q, k-q)\lambda(-q,k) \times$$

$$\times \nu_q \{ \frac{F_2(k,k-q)[F_2(k-q, k_1-q) - F_2(k,k_1)](F_1(k) - F_1(k-q))}{[F_1(k) - F_1(k-q)]^2 - \omega_q^2 F_2^2(k, k-q)} + \qquad /35/$$

$$+ \frac{F_2(k-q,k)[F_2(k-q, k_1-q) - F_2(k,k_1)](F_1(k-q) - F_1(k))}{[F_1(k-q) - F_1(k)]^2 - \omega_q^2 F_2^2(k-q,k)}.$$

Пренебрежем в низкотемпературной области членами $\omega_q^2 F_2^2(k_1-q, k_1) \sim q^4$ по сравнению с членами $[F_1(k_1) - F_1(k_1-q)]^2 \sim q^2$. Используя представление /19/ для $\omega_q \ll |\Sigma|$, для малых q и $k' \to 0$ получим

$$\langle\langle a^+_k a_{k+k'} | \rho_{-k'} \rangle\rangle_{i\eta} =$$

$$= F_2(k, k+k')[1 + (\frac{dF_1}{\partial \varepsilon_k})^{-2} \sum_q (\Delta(q, k-q) - \Delta(q,k))]. \qquad /36/$$

Здесь $\Delta(q,k)$ определяет зависящие от температуры поправки к функции Грина в приближении когерентного потенциала

$$\Delta(q,k) = 2\lambda^2 q \nu_q (\int d\omega\, f'(\omega)[\,\mathrm{Im}\{\frac{1}{\omega - \Sigma(\omega) - \varepsilon_k}\}]^2)^2. \qquad /37/$$

Для температур $kT \ll \varepsilon_f$ можно записать

$$\int d\omega\, f'(\omega) A(\omega, \varepsilon_k) = -A(\varepsilon_f, \varepsilon_k). \qquad /38/$$

С учетом /35/-/38/ проводимость сплава представим в виде суммы

$$\sigma = \sigma_{CPA} + \Delta\sigma(T),$$

где

$$\sigma_{CPA} = \frac{e^2}{\Omega} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}\right)^2 \left[\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\varepsilon_f - \Sigma(\varepsilon_f) - \varepsilon_k}\right\}\right]^2 \qquad /39/$$

– электропроводность сплава в приближении когерентного потенциала[4] и

$$\Delta\sigma(T) = \frac{2e^2\lambda^2}{\Omega} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}\right)^2 \sum_q q\nu_q \left(\left[\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\varepsilon_f - \Sigma(\varepsilon_f) - \varepsilon_{k-q}}\right\}\right]^4 - \right. \qquad /40/$$

$$\left. - \left[\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\varepsilon_f - \Sigma(\varepsilon_f) - \varepsilon_k}\right\}\right]^4\right).$$

В приближении эффективной массы электронов с $\varepsilon_k \approx \varepsilon_f$ зависящая от температуры поправка /40/ перепишется в виде

$$\Delta\sigma(T) = \frac{2e^2\lambda^2}{\Omega m^{*2}} \sum_{kq} q^3\nu_q \left[\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\varepsilon_f - \Sigma(\varepsilon_f) - \varepsilon_k}\right\}\right]^4. \qquad /41/$$

Поскольку $\Delta\sigma(T)$ - положительно определенная величина, следовательно, в сильно разупорядоченном сплаве, когда электрон-фононное взаимодействие меньше рассеяния вследствие неупорядоченности, температурный коэффициент сопротивления становится отрицательным. Подчеркнем, однако, что это является лишь оценкой, а не строгим утверждением.

ЛИТЕРАТУРА

1. Mooij J.H. phys.stat.sol. 1973, A17, p. 521.
2. Markowitz D. Phys.Rev.1977, B15, p. 3617.
3. Harris R., Shalmon M., Zuckermann M. Phys.Rev., 1978, B18, p. 5906.
4. Velicky B. Phys.Rev., 1969, 184, p. 614.
5. Levin K., Velicky B., Ehrenreich H. Phys.Rev., 1970, B2, p. 1771.
6. Brouers F., Vedyaev A.V. Phys.Rev., 1972, B5, p. 348.
7. Elk K., V. Christoph, phys.stat.sol. (b), 1976, 77, K151.
8. Kudrnovsky J., Petru J. phys.stat.sol. (b), 1977, 84, p.325.
9. Elk K., Christoph V., Richter J. phys.stat.sol. (b), 1979, K39, p. 91.

10. Goedsche F., Richter R., Vojta G. phys.stat.sol. (b), 1979, 91, p. 581.
11. Elk K., Richter J., Christoph V. J. Phys., 1979, F9, p. 307.
12. Argyres P.N., Papadopoulos S.C. Phys.Rev., 1981, B23, p.2455.
13. Chen A.B., Weisz G., Sher A. Phys.Rev., 1972, 88, p. 2897.
14. Kolley E., Kolley W. phys.stat.sol.(b), 1977, 79, p. 325.
15. Wysokinski K. J.Phys., 1978, C11, p. 291.
16. Girvin S.M., Jonson M. Phys.Rev., 1980, B22, p. 3583.
17. Christoph V. phys.stat.sol. (b), 1979, 91, p. 593.
18. Barisic S., Labbe J., Friedel J. Phys.Rev.Lett., 1970, 25, p. 919.
19. Christoph V., Kuzemsky A.L. phys.stat.sol. (b), 1982, K1, p. 111.
20. Pinski F.J., Allen P.B., Butler W.H. Phys.Rev., 1981, B23, p. 5080.
21. Yamashita J., Asano S. Phys.Soc.Japan, 1981, 50, p. 2598.
22. Wysokinski K.I., Kuzemsky A.L. phys.stat.sol., 1982, 113, p. 409.
23. Kerker G., Bennemann K.H. Soll.St.Comm., 1974, 15, p. 29.
24. Куземский А.Л., Холас А., Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-82-493, Дубна, 1982.
25. Plakida N.M. J.Exo. Theor. Phys., 1967, 53, p. 2041.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 апреля 1983 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Д1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Кристоф Ф., Кузeмский А.Л.

Р17-83-260

Влияние электрон-фононного взаимодействия на электропроводность разупорядоченных сплавов переходных металлов

Развита теория электропроводности в разупорядоченных сплавах переходных металлов с учетом нелокального электрон-фононного взаимодействия. Фононы рассматриваются микроскопическим образом. Получено интегральное уравнение для двухчастичной функции Грина, необходимой для вычисления проводимости. Необходимое структурное усреднение проводилось в приближении когерентного потенциала. В пределе слабого рассеяния получен результат Блоха-Грюнайзена. В случае сильного потенциального рассеяния показана возможность того, что температурный коэффициент сопротивления становится отрицательным.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Christoph F., Kuzemsky A.L.

P17-83-260

The Influence of the Electron-Phonon Interaction on the Electroconductivity of disordered Transition Metal Alloys

A theory of electroconductivity in disordered transition metal alloys with the proper microscopic treatment of the nonlocal electron-phonon interaction has been developed. An integral equation for the two-particle Green function needed for calculation of the conductivity has been obtained, where the structural averaging has been performed in the framework of the CPA. In the weak scattering limit the Bloch-Grüneisen result has been obtained where for a strong potential scattering the temperature coefficient of the resistivity has been shown to be negative.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод авторов.