

无序晶态合金的电阻率

雷 啸 霖

(中国科学院上海冶金研究所)

1980年1月28日收到

提 要

基于 Baym 原则,将 Ziman 型液态金属电阻理论推广到晶态金属及替代式的无序合金系统,给出了电阻率的一般表达式,讨论了它们的低温和高温行为. 低温下用德拜晶格振动模型,无序晶态系统的电阻率可表为 $\rho = \rho_0 + \rho_d \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 + \rho_i \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5$,与实验一致. 高温下,考虑到 Debye-Waller 因子及多声子效应,电阻率趋向饱和. 用独立原子振动近似得到的简单公式与实验资料的比较表明: 类似 Nb 这种电阻率的高温非线性偏离可以在本文的模型中自然地得到说明.

一、引 言

近年来,金属及合金电阻率的温度依赖性问题引起了广泛的兴趣. 按照标准的 Bloch-Grüneisen 理论,金属中声子引起的电阻率在低温下正比于 T^5 (T 是绝对温度), 高温下正比于 T . 但是,不仅非晶态及结构无序材料的电阻率不满足这个规律,就是在晶态金属及合金中也发现了很多偏离这一规律的电阻反常现象. 例如,在 Sn 基稀合金^[1]、Cu 基稀合金^[2]中以及 V_3Si ^[3]、 Nb_3Sn ^[4] 等高 T_c 的 A15 化合物中都发现低温电阻率有明显的 T^2 行为. 许多金属及合金的高温电阻率都不同程度地偏离线性;从纯 Nb^[5] 到一系列金属间化合物^[6,7],在高温下随温度升高电阻率的增加越来越慢(饱和现象).

为了解释这些反常行为,提出过许多模型. 例如 Webb 等人^[4]及 Morton 等人^[8]认为非德拜形式的声子谱是 A15 化合物低温电阻率 T^2 依赖性的根源. 对高温电阻率偏离 T 线性的解释则有: 电子费密能级附近态密度和费密速度的尖锐结构引起的附加温度变化^[9,10], 晶格振动的非谐性^[11], 电子平均自由程变短时电声子相互作用中低频声子的失效^[8,12],等等. 这些模型虽各有道理,但都有待进一步证实. 看来,在不同材料中造成电阻反常的原因可能是不同的. 但是,鉴于电阻率温度依赖性的反常现象在晶态系统也相当普遍地存在,有必要再看一看从通常的电声子相互作用模型出发能够在多大程度上找到对它们的理解. 而一个对晶态系统适用的 Ziman 型电阻理论可能有助于排除一些细节而考虑被通常理论忽略了的某些重要因素.

以近自由电子为基础的 Ziman 液态金属电阻理论^[13]及其推广^[14,15]获得的巨大成功表明: 尽管液态金属中原子间距很小,电子的平均自由程相当短,但对电子的输运过程来说,近自由电子加刚性离子 muffin-tin 势 ϵ 矩阵模型还是把握了主要的物理本质. 很自

然想到把这个理论推广到固体。由液态金属推广到非晶态金属是直接的,已有不少作者进行这方面的工作^[16-20],取得了令人鼓舞的结果;但是把 Ziman 理论推广到晶态固体则还未见有很多的尝试,虽然 Baym^[21] 早就提出过借助动态结构因子描述纯金属中电子输运现象的方程。本文的目的是按 Baym 的原则先建立一个适用于纯金属及替代式无序晶态合金的 Ziman 型电阻理论,并据此讨论这些系统电阻率的温度依赖性。

二、无序晶态系统电阻率的 Ziman-Baym 表达式

替代式的无序晶态合金系统与非晶态和液态的区别是仍然存在严格的结构有序,它的结构因子中含有 δ 函数型的布拉格反射峰。但我们知道,严格的周期势不散射金属中的电子,对电子输运是没有贡献的。按照 Baym^[21] 提出的原则,考虑晶格振动对电子的散射时,需要也只需要从体系的动态结构因子中减去弹性散射的布拉格峰。

设合金中含有 r 种不同的总共 N 个原子,它们处于立方对称的点阵结点上,各组元的分布不存在长程有序。假定对输运过程起主要作用的电子可以用近自由电子模型描述,它的费密面是球对称的,费密面波矢为 k_F ,费密速度为 v_F 。设电子在固体中受到的总散射势等于各原子所携带的刚性 muffin-tin 势的叠加,并用 t 矩阵描述电子受到的散射。按变分法求解玻尔兹曼方程,选择通常的试探函数,很容易证明电阻率可以表示为

$$\rho = \frac{3\pi Q_0}{e^2 \hbar v_F^2} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right)^4 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^3 \mathcal{M}'(K), \quad (1)$$

式中 Q_0 是原子体积, e 是电子电荷, $\hbar$ 是普朗克常数,

$$\mathcal{M}'(K) \equiv \int \frac{dQ_K}{4\pi} \mathcal{M}'(\mathbf{K}), \quad (2)$$

$$\mathcal{M}'(\mathbf{K}) = \int d\omega \frac{\beta \hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \mathcal{M}'(\mathbf{K}, \omega), \quad (3)$$

$\mathcal{M}'(\mathbf{K}, \omega)$ 表示合金的动态散射因子 $\mathcal{M}(\mathbf{K}, \omega)$ 中减去弹性布拉格峰所剩下的部分, $K = |\mathbf{K}|$ 。

设合金中各组元的质量差别不大,作为初步近似,可忽略不同原子热振动行为的差异,用一个平均质量为 M 的原子组成的晶格的振动来描述合金中原子的振动。在简谐近似下,体系中有 $3N$ 支独立的格波。设第 $q \equiv (\mathbf{q}, j)$ 支波的频率是 ω_q , 偏振矢量是 $\mathbf{e}_q$, 则动态散射因子可以写成

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(\mathbf{K}, \omega) = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} t_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{K}) t_{\mathbf{l}'}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} e^{-2W} \int \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \exp \left\{ \frac{\hbar}{2NM} \right. \\ & \times \sum_q \frac{|\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_q|^2}{\omega_q} \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')) [n_q e^{-i\omega_q t} + (1 + n_q) e^{i\omega_q t}] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (4)$$

式中

$$2W = \frac{\hbar}{NM} \sum_q \frac{|\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_q|^2}{\omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \right) \quad (5)$$

是 Debye-Waller 因子; $t_{\mathbf{l}}(\mathbf{K})$ 表示处于第 $\mathbf{l}$ 个格点上的原子的势对费密面上两个电子态的散射矩阵元(假设它只依赖于始态和终态波矢的夹角),计算这个矩阵元的波函数 ψ 是

在原子体积中规一化的:

$$\int_{\Omega_0} \phi^* \phi d\tau = 1;$$

此外,

$$n_q \equiv (e^{\beta \hbar \omega_q} - 1)^{-1}$$

是玻色函数, $\beta \equiv 1/k_B T$, k_B 是玻耳兹曼常数.

电阻散射因子 $\mathcal{M}(\mathbf{K})$ 包括弹性过程及所有的多声子过程. 由于玻色因子的存在, 它与弹性散射因子

$$\mathcal{M}^e(\mathbf{K}) = \int d\omega \mathcal{M}(\mathbf{K}, \omega) \quad (6)$$

的温度依赖性在低温下是大不相同的. 讨论低温电阻率时必须注意这一点.

三、低温及中温情形

其实, 只要温度不太高, 多声子过程就是不重要的. 展开 (4) 式中的 $\exp$ 因子, 只保留到单声子项, 可将电阻散射因子写成

$$\mathcal{M}(\mathbf{K}) = \mathcal{M}_0(\mathbf{K}) + \mathcal{M}_1(\mathbf{K}), \quad (7)$$

$$\mathcal{M}_0(\mathbf{K}) = e^{-2W} I(\mathbf{K}), \quad (8)$$

$$\mathcal{M}_1(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2}{NM k_B T} \sum_q \frac{|\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_q|^2}{(e^{\beta \hbar \omega_q} - 1)(1 - e^{-\beta \hbar \omega_q})} I(\mathbf{K} - \mathbf{q}), \quad (9)$$

$$I(\mathbf{K}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} t_{\mathbf{l}}^* t_{\mathbf{l}'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')}. \quad (10)$$

(9) 式中的 e^{-2W} 因子已经略去了, 因为 $\mathcal{M}_1(\mathbf{K})$ 已经是强烈依赖于 T 的, 而低、中温下, $e^{-2W} \simeq 1$.

引入平均散射矩阵

$$\bar{t} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} t_{\mathbf{l}} = \sum_{\alpha=1}^r c_{\alpha} t_{\alpha} \quad (11)$$

(t_{α} 表示第 α 种原子的散射矩阵, c_{α} 是合金中第 α 种组元所占的原子百分比, $\sum_{\alpha=1}^r c_{\alpha} = 1$),

$I(\mathbf{K})$ 可表示成

$$I(\mathbf{K}) = I_1(\mathbf{K}) + I_2(\mathbf{K}), \quad (12)$$

$$I_1(\mathbf{K}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} = N |\bar{t}|^2 \sum_{\mathbf{H}} \delta_{\mathbf{K} - \mathbf{H}}, \quad (13)$$

$$I_2(\mathbf{K}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} c_{\alpha} c_{\alpha'} |t_{\alpha} - t_{\alpha'}|^2 \left[1 - \sum_{\mathbf{l} \neq 0} R^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{l}) \right]. \quad (14)$$

这里 $\mathbf{H}$ 表示倒格矢, $R^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) \equiv [P^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l})/c_{\alpha} c_{\alpha'}] - 1$ 是相关函数, $P^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l})$ 表示晶格中相距为 $\mathbf{l}$ 的两个格点上始端为第 α 种原子、终端为第 α' 种原子的几率¹⁾. 对于没有长程序的情

1) 这里, 为了书写简便, 我们假设各个格点是等价的, 即晶格是布拉菲格子.

况,当 l 大于几个元格矢时 $R^{aa'}(l) = 0$, 所以 $I_2(K)$ 将是一个弥散分布的函数, 散射因子中唯一的弹性布拉格峰是 $\mathcal{M}_0(K)$ 中包含 $I_1(K)$ 的项. 除去这项以后, 我们得到无序晶态合金系统低、中温下电阻率的表达式

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_H, \quad (15)$$

ρ_1 是 $I_2(K)$ 在弹性散射过程的贡献, 它可以写成

$$\rho_1 = \frac{3\pi Q_0}{e^2 \hbar v_F^2} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right)^4 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^3 \frac{1}{2} \sum_{a,a'} c_a c_{a'} |t_a - t_{a'}|^2 [1 - Q_0^{aa'}(K)] e^{-2W}, \quad (16)$$

$$Q_0^{aa'}(K) \equiv \sum_{l \neq 0} Z_l R^{aa'}(l) \frac{\sin Kl}{Kl}. \quad (17)$$

这里 $l = |l|$ 是格矢的长度, Z_l 是离开一个格点的距离为 l 的原子数目. 假定晶格振动可用德拜模型描述: 对每一个 q 的三支独立振动, 一支是纵波二支是横波, 并且近似用一个等效德拜温度 Θ 来综合代表纵波和横波的色散关系. 则 Debye-Waller 因子为

$$\begin{aligned} 2W &= 2W_0(K) + 2W_T(K), \\ 2W_0(K) &= \frac{3\hbar^2 K^2}{4M k_B \Theta}, \\ 2W_T(K) &= 2W_0(K) 4 \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^{\Theta/T} \frac{x dx}{e^x - 1}. \end{aligned} \quad (18)$$

低、中温下 $2W_T(K)$ 是小量, 将指数 e^{-2W} 展开, 保留最低阶可得

$$\rho_1 = \rho_0 - \rho', \quad (19)$$

$$\rho_0 = \frac{3\pi Q_0}{e^2 \hbar v_F^2} D_3, \quad (20)$$

$$\rho' = \frac{24\pi \hbar Q_0 k_F^3}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} D_5 \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^{\Theta/T} \frac{x dx}{e^x - 1}, \quad (21)$$

$$D_3 \equiv \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right)^4 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^3 T(K), \quad (22a)$$

$$D_5 \equiv \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right)^6 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^5 T(K), \quad (22b)$$

$$T(K) \equiv \frac{1}{2} \sum_{a,a'} c_a c_{a'} |t_a - t_{a'}|^2 [1 - Q_0^{aa'}(K)]. \quad (22c)$$

与温度无关的因子 $\exp[-2W_0(K)] \simeq 1$, 已经略去了. 低温 ($T \ll \Theta$) 下,

$$\rho' \simeq \rho_d \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2, \quad (23)$$

$$\rho_d = \frac{4\pi^3 \hbar Q_0 k_F^2}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} D_5. \quad (23a)$$

(15) 式中的第二项是 $I_2(K)$ 在单声子过程中的贡献, 其表达式为

$$\rho_2 = \frac{24\pi \hbar Q_0 k_F^2}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right)^6 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^5 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^2 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} T(K, q), \quad (24)$$

$$T(K, q) = \frac{1}{2} \sum_{a,a'} c_a c_{a'} |t_a - t_{a'}|^2 \left[1 - \sum_{l \neq 0} Z_l R^{aa'}(l) \frac{\sin(Kl)}{Kl} \frac{\sin(ql)}{ql} \right], \quad (24a)$$

式中 $q = q_D T/\Theta$, q_D 是德拜球的半径. 由于函数 $x^2/[(e^x - 1)(1 - e^{-x})]$ 在大 x 迅速

趋于零, 所以 $T \ll \Theta$ 时可认为 $\sin ql/ql \simeq 1$, 因而低温下

$$\rho_2 \simeq 2\rho_d \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2, \quad (25)$$

这样, $\rho_1 + \rho_2$ 在低温下有一个正的 T^2 项,

$$\rho_1 + \rho_2 \simeq \rho_0 + \rho_d \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2. \quad (26)$$

当 $T \gtrsim \Theta$ 时, ρ_1 和 ρ_2 的温度依赖部分都随 T 线性变化, 但二者有相当大的抵消:

$$\rho_1 + \rho_2 \simeq \rho_0 + \bar{\rho}_d \frac{T}{\Theta}, \quad (27)$$

$$\bar{\rho}_d = \frac{24\pi\hbar\Omega_0 k_F^2}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 6 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^5 \frac{1}{2} \sum_{a,a'} c_a c_{a'} |t_a - t_{a'}|^2 [Q_0^{aa'}(K) - Q_1^{aa'}(K)], \quad (28)$$

$$Q_l^{aa'}(K) \equiv \sum_{l \neq 0} Z_l R^{aa'}(l) \frac{\sin(Kl)}{Kl} \frac{\text{si}(q_D l)}{q_D l}, \quad (28a)$$

$$\text{si}(x) \equiv \int_0^x \frac{\sin u}{u} du. \quad (28b)$$

$\bar{\rho}_d T/\Theta$ 通常比 ρ_H (当 $T \gtrsim \Theta$ 时, 它也是随 T 线性变化的) 小得多, 可以忽略.

(15) 式中的最后一项 ρ_H 是 $I_1(\mathbf{K})$ 在单声子过程中的贡献. 在同样的晶格振动模型下, 它可以写作

$$\rho_H = \frac{3\pi\hbar\Omega_0}{4e^2 M v_F^2 k_F^4 k_B T} \sum_{\mathbf{H}} \int_{\Delta_{\mathbf{H}}} \frac{dK d\Omega_K}{4\pi} \frac{K^5 |\bar{i}|^2}{(e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}})}, \quad (29)$$

式中 $\Delta_{\mathbf{H}}$ 表示当 $K \leq 2k_F$ 时, 使 $\mathbf{K} - \mathbf{H}$ 在德拜球内的 $\mathbf{K}$ 空间的区域, 求和是对所有有贡献的倒格矢. 显然, (29) 式就是一个具有平均散射矩阵 $\bar{i}$ 的原子组成的晶格的 Bloch-Grüneisen 电阻, 包含 N 过程和 U 过程的贡献. 通常情况, 在足够低的温度下 ρ_H 给出 T^5 规律,

$$\rho_H \simeq \rho_i \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5, \quad (30)$$

$$\rho_i = 124.4 \times \frac{27\pi^5 \hbar |\bar{i}_0|^2}{e^2 M \Omega_0 v_F^2 k_F^4 k_B \Theta}. \quad (30a)$$

($\bar{i}_0$ 表示 $\bar{i}(K)$ 在 $K = 0$ 之值.) 当 $T \gtrsim \Theta$ 时, ρ_H 就是通常的线性项.

综上所述, 结构上有序而成分无序的晶态合金系统低温下 ($T \ll \Theta$) 的电阻率可以如下形式表示:

$$\rho = \rho_0 + \rho_d \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 + \rho_i \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5. \quad (31)$$

上式中 ρ_0 是剩余电阻, T^5 项是通常的理想电阻, T^2 项是成分无序引起的声子对电阻率的附加贡献.

(31) 式中 T^2 项与 T^5 项系数之比可估计为 (以 A 和 B 两种组元的合金为例)

$$a \equiv \frac{\rho_d}{\rho_i} \simeq 0.43 c_A c_B \frac{|t_A - t_B|_{\text{eff}}^2}{|\bar{i}_0|^2} \left(\frac{k_F}{q_D}\right)^6,$$

$|t_A - t_B|_{\text{eff}}^2$ 表示 $|t_A - t_B|^2$ 的一个等效中值. a 的大小依赖于两组元散射矩阵的差异及

两组的浓度。对纯金属及两组元散射矩阵相近的合金, $a \simeq 0$, 低温电阻率遵从 T^5 定律; 否则低温电阻率中既有 T^2 项又有 T^5 项。以 $c_A = c_B = 0.5$ 的高浓度合金为例, 如估计 $|t_A - t_B|^2_{\text{eff}}/|\bar{t}_0|^2 \sim 0.1$, $(k_F/q_D)^6 \sim 0.3$, 则 $a \sim 3 \times 10^{-3}$; 因而当 $T \lesssim 0.2\Theta$ 时, T^2 项的大小已可与 T^5 项相比。对于稀合金, 如果加入的杂质组元的散射矩阵比基质材料的散射矩阵大得多, a 也可能是相当大的。由此可见, 无序合金低温电阻率的温度依赖性与 T^5 定律可能大不相同。

在稀合金中, (31) 式的 T^5 项可认为与基质纯金属电阻率的温度依赖部分相同, 所以 $\rho_d(T/\Theta)^2$ 项代表一个由成分无序引起的对马提生规则的偏离 $\Delta\rho$ 的贡献。诚然, 在非常稀的合金中, 一般认为各向异性可能是偏离马提生规则的主要原因; 但实验上并没有看到 $\Delta\rho$ 饱和的迹象, 而且发现当杂质浓度增加到一定程度时, Cu 基合金中 $\Delta\rho$ 随温度的变化在低温下趋于 T^2 行为: $\Delta\rho \simeq b\rho_0 T^2$, b 的数值大致是 $1 \times 10^{-6}\text{K}^{-2}$ 的量级。按照 (31) 式,

$$b = \frac{\rho_d}{\rho_0 \Theta^2} = \frac{4\pi^2 \hbar^2 k_F^2}{3M k_B \Theta^3} \frac{D_5}{D_3}.$$

因为 $D_5/D_3 \sim 1$, 对于 Cu ($M = 63.6 \text{ amu}$, $\Theta \simeq 315 \text{ K}$, $\Omega_0 \simeq 11.7 \text{ \AA}^3$, k_F 可估计为 $k_F = (3\pi^2/\Omega_0)^{1/3} \simeq 1.4 \text{ \AA}^{-1}$), (31) 式预言的 $b \sim 0.7 \times 10^{-6}\text{K}^{-2}$, 表明这个数量级的偏离是可以由成分无序引起的。

四、高温情形

当温度足够高时, 多声子贡献可能起重要作用, 只保留单声子项不能得到正确的温度依赖性。但另一方面, 高温下 (3) 式中的因子 $\beta\hbar\omega/(e^{\beta\hbar\omega} - 1) \simeq 1$, 电阻散射因子 $\mathcal{M}(\mathbf{K})$ 可用弹性散射因子 $\mathcal{M}^e(\mathbf{K})$ 代替:

$$\mathcal{M}(\mathbf{K}) \simeq \mathcal{M}^e(\mathbf{K}) = \int d\omega \mathcal{M}(\mathbf{K}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} t_{\mathbf{l}}^* t_{\mathbf{l}'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} e^{-2W\phi(\mathbf{l} - \mathbf{l}')}, \quad (32)$$

式中

$$2W\phi(\mathbf{l} - \mathbf{l}') \equiv \frac{\hbar}{NM} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}}|^2}{\omega_{\mathbf{q}}} \left(n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) [1 - \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}'))]. \quad (33)$$

分出弹性散射部分, 重新组合之后可把 $\mathcal{M}^e(\mathbf{K})$ 写成

$$\mathcal{M}^e(\mathbf{K}) = \mathcal{M}_B^e(\mathbf{K}) + \mathcal{M}_1^e(\mathbf{K}) + \mathcal{M}_2^e(\mathbf{K}) + \mathcal{M}_3^e(\mathbf{K}), \quad (34)$$

其中

$$\mathcal{M}_B^e(\mathbf{K}) = |\bar{t}|^2 e^{-2W} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')}, \quad (35)$$

$$\mathcal{M}_1^e(\mathbf{K}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} c_{\alpha} c_{\alpha'} |t_{\alpha} - t_{\alpha'}|^2 \left[e^{-2W} - \sum_{\mathbf{l} \neq 0} R^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{l}) e^{-2W\phi(\mathbf{l})} \right], \quad (36)$$

$$\mathcal{M}_2^e(\mathbf{K}) = |\bar{t}|^2 (1 - e^{-2W}), \quad (37)$$

$$\mathcal{M}_3^e(\mathbf{K}) = |\bar{t}|^2 \sum_{\mathbf{l} \neq 0} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{l}} (e^{-2W\phi(\mathbf{l})} - e^{-2W}). \quad (38)$$

(37) 式中的

$$|\overline{t}|^2 = \frac{1}{N} \sum_l |t_l|^2 = \sum_{a=1}^r c_a |t_a|^2.$$

显然, $\mathcal{M}_B^*(\mathbf{K})$ 是弹性布拉格反射峰, 应当除去, 剩下的 $\mathcal{M}_1^*(\mathbf{K})$, $\mathcal{M}_2^*(\mathbf{K})$ 和 $\mathcal{M}_3^*(\mathbf{K})$ 对电阻率都是有贡献的, 代入方程 (1) 即可写出电阻率的表达式. 一般地说, 电阻率不但依赖于散射矩阵, 也依赖于晶格结构, $2k_F$ 的位置以及声子的色散关系.

作为电阻率随温度变化规律的定性研究, 在高温下我们采用独立原子振动模型作为初步近似. 在这个模型下, $2W\phi(\mathbf{l}) = 2W$, $\mathcal{M}_3^*(\mathbf{K}) = 0$,

$$\mathcal{M}_1^*(K) = \frac{1}{2} \sum_{a,a'} c_a c_{a'} |t_a - t_{a'}|^2 [1 - Q_0^{aa'}(K)] e^{-2W(K)}. \quad (39)$$

于是, 合金的高温电阻率可写成

$$\rho = \rho_1 + \rho_T, \quad (40)$$

$$\rho_T = \frac{3\pi Q_0}{e^2 \hbar v_F^2} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 4 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^3 |\overline{t}|^2 [1 - e^{-2W(K)}], \quad (41)$$

ρ_1 的表达式见 (16) 式. 因为当温度升高时, $\exp(-2W)$ 是逐渐减小的, 所以 (40) 式表明随着温度升高电阻率原则上总是趋向有限值

$$\rho^* = \frac{3\pi Q_0}{e^2 \hbar v_F^2} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 4 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^3 |\overline{t}|^2, \quad (42)$$

而不是如通常理论预言的随 T 线性增加. ρ^* 的值一般在几十到几百 $\mu\Omega \cdot \text{cm}$ 之间, 对不同的金属是不同的.

注意到 $\exp[-2W(K)]$ 是 K 的缓变函数, 而 (16) 式及 (41) 式中的积分主要权重是在 K 接近 $2k_F$ 处, 可将 (40) 式近似写成

$$\rho \simeq \rho_0 e^{-f(T)} + \rho^* (1 - e^{-f(T)}), \quad (43)$$

式中,

$$f(T) = 2W(2k_F) = \frac{4\hbar k_F^2}{M} \int d\omega \frac{g(\omega)}{\omega} \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \right) \simeq \frac{T}{T_s} + \delta_s, \quad (44)$$

$$T_s = \frac{M}{4k_B k_F^2 \langle \omega^{-2} \rangle}, \quad \langle \omega^{-2} \rangle \equiv \int d\omega \frac{g(\omega)}{\omega^2}, \quad (45)$$

$$\delta_s = \frac{2\hbar k_F^2 \langle \omega^{-1} \rangle}{M}, \quad \langle \omega^{-1} \rangle \equiv \int d\omega \frac{g(\omega)}{\omega}, \quad (46)$$

$g(\omega)$ 是归一化声子谱; ρ_0 仍由 (20) 式表示. 但我们应注意: 高温下, 合金中的短程有序相关参量随温度升高而变小, (20) 式所表达的“剩余电阻”可能有一定的温度依赖性.

纯 Nb 高温电阻率非线性偏离的原因在文献上是一个有争论的问题^[22,23], 迄今未见到满意的解释. (43) 式可以给出一个自然的说明. 依照 Nakagawa 和 Woods^[24] 由中子非弹性散射得到的 Nb 声子谱, 设 $k_F = 1.5 \text{ \AA}^{-1}$, 从 (45) 和 (46) 式可算得

$$T_s = 4800 \text{ K 和 } \delta_s = 0.013.$$

据此按 (43) 式 (取 $\rho_0 = 0$, $\rho^* = 208 \mu\Omega \cdot \text{cm}$) 计算的电阻率曲线以及 Пелецкий^[5] 从大量资料总结的经验值均画于图 1 中. 参数的合理性以及与实验符合的情况表明: 象纯 Nb 这种类型的高温电阻行为可以在我们的模型中得到理解.

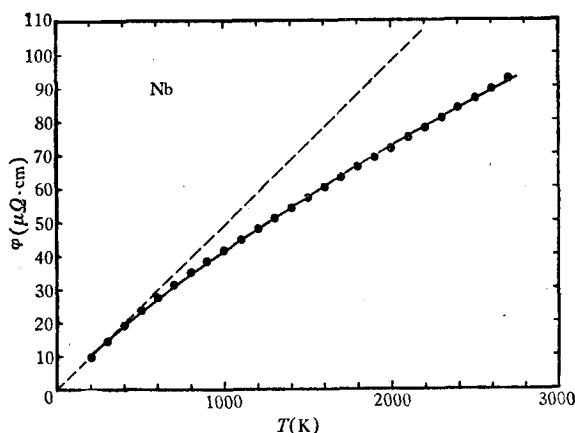


图1 Nb 电阻率作为温度的函数

圆点是 Пелецкий 经验值^[5]; 实线由(43)式计算 ($\rho_0 = 0$, $\rho^* = 208 \mu\Omega \cdot \text{cm}$, $T_s = 4800 \text{K}$, $\delta_s = 0.013$); 虚线为室温值线性外推

五、小 结

我们在晶格原子作相关简谐振动的条件下,按照 Baym 原则把 Ziman 液态金属电阻理论推广到成分无序的晶态合金系统,讨论了其电阻率的低温和高温行为。

低温下只考虑单声子贡献,采用晶格振动的德拜模型,发现 $T \ll \Theta$ 时,无序晶态合金的电阻率可表示为

$$\rho = \rho_0 + \rho_d \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 + \rho_i \left(\frac{T}{\Theta} \right)^5,$$

T^5 项是通常的 Bloch-Grüneisen 电阻,它在晶态中总是存在的。 T^2 项则是合金系统的特征,它的大小强烈依赖于各组元散射矩阵的差异及各组元的浓度,对不同的合金有很大的变化。这个 T^2 项可以比电子-电子散射引起的 T^2 贡献大得多,当温度低到德拜温度的几分之一到十几分之一时,就能与 T^5 项贡献相比,因而对合金低温电阻率的温度依赖性可起重要的作用。这一特点与许多合金中观察到的电阻率温度行为是符合的。

应当指出,我们预言的 T^2 项永远为正,而且 ρ_d 随 ρ_0 的增加而变大。因为我们考虑的是一个结构完整成分不存在长程有序的合金系统,其剩余电阻 ρ_0 及 T^2 项完全来自成分无序。这种无序一般不会引起很高的 ρ_0 。非常高的 ρ_0 往往是结构无序(如非晶态,辐照引起的大量缺陷等)所致。所以,某些高剩余电阻金属中的低温电阻行为(随剩余电阻增加电阻温度系数变小,甚至变为负值)自然不能期望在本文的模型中得到说明。

在高温情况下,只考虑单声子效应还不够,但独立原子振动模型或许是一个可用的初步近似。在这种情况下可将高温电阻率温度依赖关系写成很简单的形式。由于考虑了 Debye-Waller 因子及多声子效应,高温电阻率不同于只考虑单声子过程的通常理论预言的随 T 变化,而是趋向饱和的。这个结果可以说明象纯 Nb 这种类型的高温电阻率非线性偏离。但是 A15 化合物电阻率在不太高的温度下就迅速饱和的原因还需要寻找另外的解释。

作者在进行此项工作时与胡素辉、杨廷萍同志进行过有益的讨论,谨致谢意。

参 考 文 献

- [1] M. C. Karamargin *et al.*, *Phys. Rev.*, **B6**(1972), 3624.
- [2] B. Loegel, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **3**(1973), L106.
- [3] B. A. Марченко, *ФТТ*, **15**(1973), 1893.
- [4] G. W. Webb *et al.*, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2624.
- [5] В. Э. Пелецкий, *ТБТ*, **15**(1977), 2331.
- [6] D. W. Woodard, G. D. Cody, *Phys. Rev.*, **136**(1964), A166.
- [7] L. R. Testardi, J. M. Poate, H. J. Levinstein, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2570.
- [8] N. Morton, B. W. James, G. H. Wostenholm, *Cryogenics*, **18**(1978), 135.
- [9] R. W. Cohen, G. D. Cody, J. J. Halloran, *Phys. Rev. Lett.*, **19**(1967), 840.
- [10] S. D. Bader, F. Y. Fradin, *Superconductivity in d- and f-band metals* (ed. by D. H. Douglass, Plenum, 1976), p. 567.
- [11] P. B. Allen *et al.*, *Solid State Commun.*, **18**(1976), 1157.
- [12] P. J. Cote, L. V. Meisel, *Phys. Rev. Lett.*, **40**(1978), 1586.
- [13] J. M. Ziman, *Phil. Mag.*, **6**(1961), 1013; *Advan. Phys.*, **16**(1967), 551.
- [14] T. E. Faber, J. M. Ziman, *Phil. Mag.*, **11**(1965), 153.
- [15] R. Evans, D. A. Greenwood, P. Lloyd, *Phys. Lett.*, **35A**(1971), 57.
- [16] A. K. Sinha, *Phys. Rev.*, **B1**(1970), 4541.
- [17] S. R. Nagel, *Phys. Rev.*, **B16**(1977), 1694.
- [18] K. Froböse, J. Jäckle, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **7**(1977), 2331.
- [19] P. J. Cote, L. V. Meisel, *Phys. Rev. Lett.*, **39**(1977), 102.
- [20] L. V. Meisel, P. J. Cote, *Phys. Rev.*, **B17**(1978), 4652.
- [21] G. Baym, *Phys. Rev.*, **135**(1964), A1691.
- [22] P. B. Allen, *Phys. Rev. Lett.*, **37**(1976), 1638.
- [23] M. J. Laubitz *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **39**(1977), 225.
- [24] Y. Nakagawa, A. D. B. Woods, *Phys. Rev. Lett.*, **11**(1963), 271.

ELECTRICAL RESISTIVITY OF DISORDERED CRYSTALLINE ALLOYS

LEI XIAO-LIN

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

The Ziman-type theory of the electrical resistivity of liquid metals is extended to disordered crystalline alloys by means of a prescription given by Baym. The formulae for calculating the resistivity of these systems are presented and the temperature dependence of the resistivity in both low and high temperature range is discussed in some detail. By using the Debye model for lattice vibration, we can express the resistivity of a disordered system as $\rho = \rho_0 + \rho_d \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 + \rho_i \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5$ at temperatures well below

Debye temperature, Θ , this behavior is compatible with experiments. On account of the Debye-Waller factor and multi-phonon effects, the resistivity approaches saturation at high temperature instead of the exhibiting a linear T -dependence predicted by one-phonon approximation. A comparison between experimental data and a simple expression derived on the basis of the approximation of independent vibration of atom shows that the deviation from linearity of the high temperature resistivity similar to that of Nb can be understood with the present model.