

替代式合金系统的电阻率

雷 啸 霖

(中国科学院上海冶金研究所)

1980 年 2 月 20 日收到

提 要

本文将文献 [1] 的无序晶态合金电阻率理论推广到包含长程有序的系统, 从而建立了适用于晶态金属, 无序及有序替代式合金的 Ziman 型电阻率理论. 根据这个理论我们详细讨论了这类系统电阻率的温度依赖性. 文中着重指出: 合金系统结构因子的超结构峰对电阻率有重要贡献. 这个贡献在低温下是一个 T^2 项, 它比电子-电子散射引起的 T^2 项大得多, 因而合金系统电阻率在 $T \ll \Theta$ (Θ 是德拜温度) 时有 $\rho \simeq \rho_0 + \rho_a \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 + \rho_i \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$ 的形式. 据此, 许多 A-15 化合物正常态电阻率在低温下的反常行为很容易解释. 作为例子, 我们将低温电阻率的理论表达式与 V_3Si 的测量值作了比较, 符合得很好.

一、电阻率的 Ziman 型表达式

在文献 [1] 中, 基于近自由电子模型, 在费密面是球面, 散射矩阵元只依赖于电子终态和始态波矢差 $\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ 的条件下, 给出了立方对称的合金系统电阻率的 Ziman 型表达式:

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

式中 k_F 是电子的费密波矢, v_F 是电子的费密速度, Q_0 是每个原子体积, $\mathcal{M}'(\mathbf{K})$ 是电阻散射因子,

$$\mathcal{M}'(\mathbf{K}) \equiv \int d\omega \frac{\beta \hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \mathcal{M}'(\mathbf{K}, \omega), \quad (2)$$

$\mathcal{M}'(\mathbf{K}, \omega)$ 表示系统的动态散射因子 $\mathcal{M}(\mathbf{K}, \omega)$ 中减去弹性布拉格峰所剩下的部分, $\beta \equiv 1/k_B T$, k_B 是波耳兹曼常数, T 是绝对温度. 设电子在固体中受到的总散射势等于各个原子所携带的自治单粒子散射势的叠加, 而单粒子散射势对费密面上电子态的矩阵元只依赖于终态波矢与始态波矢的夹角; 同时, 忽略不同原子热振动行为的差别, 用一个平均原子振动模型来近似描述体系的晶格振动, 则替代式合金的动态散射因子可表为

$$\mathcal{M}(\mathbf{K}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{l, l'} t_l^*(K) t_{l'}(K) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} e^{-2W(K)} \int \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \exp \left\{ \frac{\hbar}{2NM} \sum_q \frac{|\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_q|^2}{\omega_q} \right. \\ \left. \cdot \cos \mathbf{q} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}') [n_q e^{-i\omega_q t} + (1 + n_q) e^{i\omega_q t}] \right\}, \quad (3)$$

式中 $t_l(K)$ 表示处于第 l 个格点上的原子的散射矩阵, $2W(K)$ 是 Debye-Waller 因子, ω_q

和 $\mathbf{e}_q$ 分别是第 $q = (\mathbf{q}, j)$ 支格波的频率和偏振矢量, $\mathbf{q}$ 的可取值限于体积为 $(2\pi)^3/\Omega_0$ 的等效布里渊区¹⁾的总共 N 个点, $j = 1, 2, 3$, n_q 是 Bose 函数, N 是合金的原子总数.

从这个公式出发, 文献 [1] 讨论了没有长程序的合金系统的低温、中温和高温电阻率. 本文将考虑存在长程有序的情况. 这样, 所得的结果可用于晶态金属、无序及有序替代式合金.

当温度足够高时, 合金中的长程有序一般要消失, 因此文献 [1] 对高温情况的讨论总是可用的. 所以本文只限于温度不太高的情形, 可以不考虑多声子效应. 只保留弹性过程和单声子过程的贡献时, 电阻散射因子可写成

$$\mathcal{M}(\mathbf{K}) = \mathcal{M}_0(\mathbf{K}) + \mathcal{M}_1(\mathbf{K}), \quad (4)$$

$$\mathcal{M}_0(\mathbf{K}) = I(\mathbf{K}), \quad (5)$$

$$\mathcal{M}_1(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2}{NMk_B T} \sum_q \frac{|\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_q|^2}{(e^{\beta\hbar\omega_q} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega_q})} I(\mathbf{K} - \mathbf{q}), \quad (6)$$

式中

$$I(\mathbf{K}) = \frac{1}{N} \sum_{l, l'} t_l^*(\mathbf{K}) t_{l'}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \quad (7)$$

是合金系统的结构因子.

二、替代式合金的结构因子

关于合金系统的结构因子在不少著作中已有详尽的讨论^[2]. 为了下面引用方便和符号一致, 本节中就所涉及处作一简单叙述.

考虑由 r 种 ($\alpha = 1, 2, \dots, r$) 不同组元构成的替代式合金, 设整个晶格共有 N_c 个重复单元(晶胞), 每个晶胞有 s 个格点 ($\lambda = 1, 2, \dots, s$), 所以 $N = N_c s$. 由 (7) 式定义的结构因子可写成

$$I(\mathbf{K}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} t_{\mathbf{m}\lambda}^*(\mathbf{K}) t_{\mathbf{m}'\lambda'}(\mathbf{K}) \exp[i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{m}') + i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_\lambda - \mathbf{r}_{\lambda'})], \quad (8)$$

式中 $\mathbf{m}$ 表示晶胞原点的格矢, $\mathbf{r}_\lambda$ 表示晶胞中第 λ 个格点离开晶胞原点的矢量.

引入第 λ 个格点的平均散射矩阵 $\bar{t}_\lambda$:

$$\bar{t}_\lambda = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{m}} t_{\mathbf{m}\lambda} = \sum_{\alpha} p_\lambda^\alpha t_\alpha. \quad (9)$$

这里 t_α 表示第 α 种原子的散射矩阵, p_λ^α 是整个晶格中第 λ 个格点被第 α 种原子占据的几率, 显然 $\sum_{\alpha} p_\lambda^\alpha = 1$. 将 $t_{\mathbf{m}\lambda}$ 写成 $\bar{t}_\lambda + (t_{\mathbf{m}\lambda} - \bar{t}_\lambda)$, 不难看出 (8) 式可写成

$$I(\mathbf{K}) = I_1(\mathbf{K}) + I_2(\mathbf{K}), \quad (10)$$

其中 $I_1(\mathbf{K})$ 可表作

$$I_1(\mathbf{K}) = N \sum_{\mathbf{H}} I_{\mathbf{H}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}, \quad (11)$$

1) 如果合金的晶格本身是布拉伐格子, 则等效布里渊区就是布拉伐格子的基本布里渊区; 若合金的晶格本身是复式格子, 则等效布里渊区是扩大的布里渊区. 在德拜模型中, 等效布里渊区就是德拜球.

$\mathbf{H}$ 是由格矢 $\mathbf{m}$ 组成的布拉伐格子的倒格矢, $\delta_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}$ 是 Kronecker 函数,

$$I_{\mathbf{H}} \equiv I_{\mathbf{H}}(\mathbf{K}) = \frac{1}{s^2} \sum_{\lambda, \lambda'} \bar{t}_{\lambda}^*(\mathbf{K}) \bar{t}_{\lambda'}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{H} \cdot (\mathbf{r}_{\lambda} - \mathbf{r}_{\lambda'})}. \quad (12)$$

$I_1(\mathbf{K})$ 中包含了合金中全部基本和超结构布拉格反射峰. 哪些 $\mathbf{H}$ 是基本反射, 哪些 $\mathbf{H}$ 是超结构反射取决于具体的晶格结构, 但 $\mathbf{H} = 0$ 总是基本反射, 而且

$$I_0 = |\bar{t}|^2, \quad (13)$$

$\bar{t}$ 表示整个晶格的平均散射矩阵.

(10) 式中的 $I_2(\mathbf{K})$ 可写成

$$I_2(\mathbf{K}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} |t_{\alpha} - t_{\alpha'}|^2 \frac{1}{s} \sum_{\lambda} p_{\lambda}^{\alpha} p_{\lambda}^{\alpha'} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} |t_{\alpha} - t_{\alpha'}|^2 \cdot \frac{1}{s} \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{l} \neq 0} \varepsilon_{\lambda}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{l}), \quad (14)$$

$$\varepsilon_{\lambda}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) \equiv p_{\lambda}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) - p_{\lambda}^{\alpha} p_{\lambda}^{\alpha'}. \quad (15)$$

这里 $\mathbf{l}$ 是以第 λ 个格点为始端的任一格矢量, 其终端假设是 λ' 格点, $p_{\lambda}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l})$ 表示其始端格点上为第 α 种原子, 终端格点上为第 α' 种原子的几率. 如果完全有序, 一种编号的格点只为同一种原子所占据, 则 $p_{\lambda}^{\alpha} p_{\lambda}^{\alpha'} = 0$ (当 $\alpha \neq \alpha'$ 时) 及 $\varepsilon_{\lambda}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) = 0$, 故 $I_2(\mathbf{K}) = 0$; 如果完全无序, 则 $p_{\lambda}^{\alpha} = c_{\alpha}$ 及 $\varepsilon_{\lambda}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l}) = 0$, 故

$$I_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} c_{\alpha} c_{\alpha'} |t_{\alpha} - t_{\alpha'}|^2. \quad (16)$$

这里 c_{α} 表示合金中第 α 种组元的原子浓度, $\sum_{\alpha} c_{\alpha} = 1$. 但存在短程有序的情况, 对于 $l = |\mathbf{l}|$ 比较小的几个近邻, $\varepsilon_{\lambda}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{l})$ 是不为零的, 所以它是反映短程有序的参量. $I_2(\mathbf{K})$ 的形式依赖于短程有序.

以二元合金为例, 设两组元为 A 和 B. s 个格点可分为两类, 第 I 类格点占的百分比是 y_1 , 第 II 类格点占的百分比为 y_2 , 每一类型的格点被同一种原子占据的几率相同, 因而可用 $p_1^{A/B}$ 表示第 I 类型格点被 A/B 原子占据的几率, $p_2^{A/B}$ 表示第 II 类型格点被 A/B 原子占据的几率. 设完全有序时 A 原子全部处于第 I 类格点, B 原子全部处于第 II 类格点, 一般情况下的长程有序情况可用长程有序参量 η 描写, 它的定义是

$$\eta \equiv p_1^A - p_2^A \equiv p_2^B - p_1^B. \quad (17)$$

则 I_2 可表为

$$I_2 = |t_A - t_B|^2 \left\{ (c_A c_B - y_1 y_2 \eta^2) - \frac{1}{2s} \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{l} \neq 0} [\varepsilon_{\lambda}^{AB}(\mathbf{l}) + \varepsilon_{\lambda}^{BA}(\mathbf{l})] \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{l}) \right\}. \quad (18)$$

三、替代式合金的电阻率

把 (4)–(7), (11) 和 (14) 式代入方程 (1), 可将合金系统电阻率写成如下几项之和:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_1 + \rho_2 + \rho_H, \\ \rho_1 &= \rho_0 - \rho' \end{aligned} \quad (19)$$

式中 ρ_1 和 ρ_2 分别是 $I_2(K)$ 在弹性过程和单声子过程的贡献,

$$\rho_0 = \frac{3\pi Q_0}{e^2 \hbar v_F^2} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 4 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^3 T(K), \quad (20)$$

$$T(K) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} |\epsilon_\alpha - \epsilon_{\alpha'}|^2 \left[\frac{1}{s} \sum_{\lambda} p_{\lambda}^{\alpha} p_{\lambda}^{\alpha'} - \frac{1}{s} \sum_{\lambda} \sum_{l \neq 0} \epsilon_{\lambda}^{\alpha \alpha'}(l) \frac{\sin Kl}{Kl} \right]. \quad (21)$$

若晶格振动用等效德拜模型描述,用 Θ 表示德拜温度,则

$$\rho_1 = \frac{24\pi \hbar Q_0 k_F^2}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 6 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^5 T(K) \int_0^{\Theta/T} \frac{x dx}{e^x - 1}, \quad (22)$$

$$\rho_2 = \frac{24\pi \hbar Q_0 k_F^2}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 6 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^5 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^2 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} T\left(K, \frac{T}{\Theta} q_D x\right), \quad (23)$$

式中 q_D 是德拜波矢,

$$T(K, q) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} |\epsilon_\alpha - \epsilon_{\alpha'}|^2 \left[\frac{1}{s} \sum_{\lambda} p_{\lambda}^{\alpha} p_{\lambda}^{\alpha'} - \frac{1}{s} \sum_{\lambda} \sum_{l \neq 0} \epsilon_{\lambda}^{\alpha \alpha'}(l) \frac{\sin Kl}{Kl} \frac{\sin ql}{ql} \right]. \quad (24)$$

容易看出,低温 ($T \ll \Theta$) 下

$$\rho_1 + \rho_2 \simeq \rho_0 + \rho_d \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2, \quad (25)$$

$$\rho_d = \frac{4\pi^3 \hbar Q_0 k_F^2}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 6 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^5 T(K); \quad (26)$$

当 $T \gtrsim \Theta$ 时,

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

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_d = & \frac{24\pi \hbar Q_0 k_F^2}{e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \int_0^1 d\left(\frac{K}{2k_F}\right) 6 \left(\frac{K}{2k_F}\right)^5 \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} |\epsilon_\alpha - \epsilon_{\alpha'}|^2 \\ & \cdot \frac{1}{s} \sum_{\lambda} \sum_{l \neq 0} \epsilon_{\lambda}^{\alpha \alpha'}(l) \frac{\sin Kl}{Kl} \left(1 - \frac{\sin q_D l}{q_D l}\right), \end{aligned} \quad (28)$$

$\bar{\rho}_d$ 一般是比较小的,常可忽略.

(19) 式中的 ρ_H 是 $I_1(K)$ 在单声子过程的贡献,它可以表为

$$\rho_H = \frac{3\pi \hbar Q_0}{4e^2 M v_F^2 k_F^4 k_B T} \sum_{\mathbf{H}} \int_{\Delta_{\mathbf{H}}} \frac{dK dQ_K}{4\pi} \frac{K^5 I_H(K)}{(e^{\beta \hbar \omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}} - 1)(1 - e^{-\beta \hbar \omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}})}, \quad (29)$$

式中的积分区域 $\Delta_{\mathbf{H}}$ 表示在 $K \leq 2k_F$ 的球中,使 $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{H}$ 在等效布里渊区内的 $\mathbf{K}$ 值范围,求和是对所有贡献的倒格矢. 我们把 ρ_H 分成三种类型的项,

$$\rho_H = \rho_N + \rho_s + \rho_U. \quad (30)$$

并分别讨论之.

1. N过程

$\mathbf{H} = 0$ 的项相当于 N 过程,它的贡献为 ρ_N . 用等效德拜谱,

$$\rho_N = \frac{3\pi \hbar Q_0}{4e^2 M v_F^2 k_F^4 k_B T} \int_0^{q_D} \frac{|\mathbf{i}|^2 K^5 dK}{(e^{\beta \hbar \omega_K} - 1)(1 - e^{-\beta \hbar \omega_K})}. \quad (31)$$

写成这个表达式时已假定 $2k_F \geq q_D$, 这在一般情况下总是满足的. 低温 ($T \ll \Theta$) 下, ρ_N

按 T^5 变化:

$$\rho_N \simeq \rho_i \left(\frac{T}{\Theta} \right)^5, \quad (32)$$

$$\rho_i = 124.4 \frac{3\pi\hbar\Omega_0 q_D^2}{4e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \left(\frac{q_D}{k_F} \right)^4 |\bar{i}_0|^2, \quad (32a)$$

$\bar{i}_0$ 表示 $\bar{i}(K)$ 在 $K=0$ 之值. 当 $T \geq \Theta$ 时,

$$\rho_N \simeq \rho_{n\theta} \left(\frac{T}{\Theta} \right), \quad (33)$$

$$\rho_{n\theta} = \frac{3\pi\hbar\Omega_0 q_D^2}{4e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \frac{1}{k_F^4} \int_0^{q_D} |\bar{i}|^2 K^3 dK. \quad (33a)$$

2. S 过程

在合金的情况下, I_H 除了在基本峰位置不为零以外, 在超结构倒格矢位置也不为零, 因而超结构峰对声子电阻率也会有贡献. 我们称之为 S 过程. 一般情况下 $2k_F$ 总要覆盖超结构倒格矢, 所以 S 过程的贡献在低温下不会消失.

例如, 考虑一个由 A 和 B 两种原子组成的二元合金. 假定格子的晶胞是体心立方结构, 晶格常数为 a , 则格矢 $\mathbf{m} = (m_1 a, m_2 a, m_3 a)$ (m_1, m_2 和 m_3 为整数). 每一个晶胞包含两个格点, 其位置可设为 $\mathbf{r}_1 = (0, 0, 0)$ 和 $\mathbf{r}_2 = (a/2, a/2, a/2)$. 晶胞格子的倒格矢为 $\mathbf{H} = \frac{2\pi}{a} (h_1, h_2, h_3)$ (h_1, h_2 和 h_3 为整数). 由 (12) 式容易看出

$$I_H = \begin{cases} |\bar{i}|^2 & \text{当 } h_1 + h_2 + h_3 = \text{偶数, 即基本倒格矢;} \\ \frac{\eta^2}{4} |t_A - t_B|^2 & \text{当 } h_1 + h_2 + h_3 = \text{奇数, 即超结构倒格矢.} \end{cases} \quad (34)$$

在 $k_x = 0$ 平面内基本倒格矢和超结构倒格矢的分布如图 1 所示. 最短的超结构倒格矢

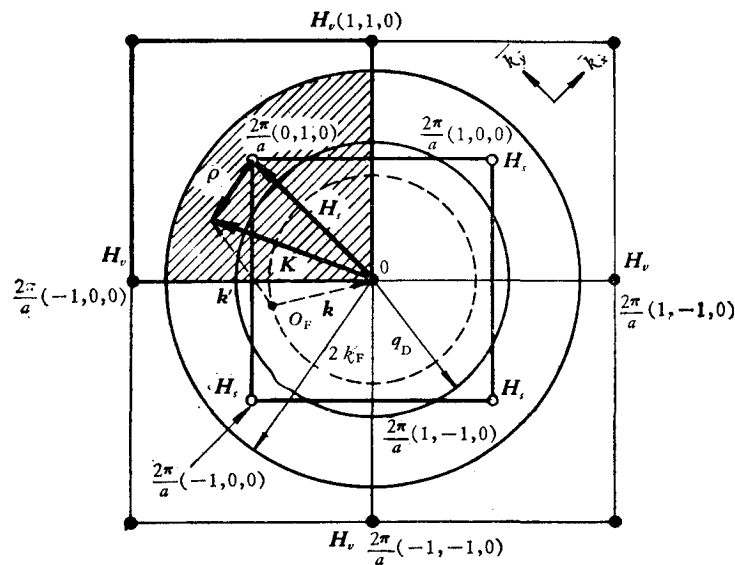


图 1 体心立方结构的基本倒格矢和超结构倒格矢

$\mathbf{H}_s = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, 0, 0)$ 等刚好落在等效布里渊区的边角上, 它们的长度是 $2\pi/a$. 一般情况下 $2k_F$ 总是超过这个长度, 因而这些超结构倒格矢总是被 $2k_F$ 球所覆盖的¹⁾.

对于一个给定的最小超结构倒格矢 $\mathbf{H}_s$, 方程 (29) 中的积分范围 $\Delta_{\mathbf{H}_s}$ 是 $2k_F$ 为半径的球与以 $\mathbf{H}_s$ 点为中心的等效布里渊区的交叠部分, 这是一个多棱锥. 一共有 Λ_s 个 (在现在的情况 $\Lambda_s = 6$) 等价的最小超结构倒格矢, 它们对电阻率的贡献相同. 为便于计算积分, 可以把多棱锥近似用一个半张角为 β_0 ($\cos \beta_0 = 2/\Lambda_s$) 的圆锥代替. 这样, 只考虑最小超结构倒格矢的贡献时,

$$\rho_s \simeq \frac{3\pi\hbar\Omega_0}{4e^2Mv_F^2k_F^4k_B T} \frac{\Lambda_s}{2H_s} \int_0^{2k_F} dK K^4 I_{\mathbf{H}_s}(K) \cdot \int_{|\mathbf{H}_s-K|}^{(H_s^2+K^2-4\Lambda_s^{-1}H_sK)^{1/2}} \frac{q dq}{(e^{\beta\hbar\omega_q} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega_q})}, \quad (35)$$

这里 $H_s = |\mathbf{H}_s|$. 用德拜模型时, ρ_s 可写成

$$\rho_s \simeq \frac{3\pi\hbar\Omega_0}{4e^2Mv_F^2k_B\Theta} \left(\frac{T}{\Theta}\right) \frac{\Lambda_s}{2H_s k_F^4} \int_0^{2k_F} dK K^4 I_{\mathbf{H}_s}(K) \cdot \int_{\frac{\Theta}{T} \frac{1}{q_D} (H_s^2+K^2-4\Lambda_s^{-1}H_sK)^{1/2}}^{\frac{\Theta}{T} \frac{1}{q_D} (H_s^2+K^2-4\Lambda_s^{-1}H_sK)^{1/2}} \frac{x dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})}. \quad (36)$$

很容易证明 (见附录) 低温下 ($T \ll \Theta$) ρ_s 可写成

$$\rho_s \simeq \rho_{si} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2, \quad (37)$$

$$\rho_{si} = \begin{cases} 0 & \text{若 } 2k_F < H_s, \\ \Lambda_s \frac{\pi^2}{3} \frac{3\pi\hbar\Omega_0 q_D^2}{4e^2Mv_F^2k_B\Theta} \frac{q_D}{k_F} \left(\frac{H_s}{k_F}\right)^3 I_{\mathbf{H}_s}(H_s) & \text{若 } 2k_F > H_s. \end{cases} \quad (37a)$$

通常 $2k_F$ 总是大于 H_s 的, 所以低温下超结构峰贡献的 T^2 项不会消失, 除非 $I_{\mathbf{H}_s}(H_s) = 0$. 当 $T \gg \Theta$ 时,

$$\rho_s \simeq \rho_{s\theta} \left(\frac{T}{\Theta}\right), \quad (38)$$

$$\rho_{s\theta} = \frac{3\pi\hbar\Omega_0 q_D^2}{4e^2Mv_F^2k_B\Theta} \frac{\Lambda_s}{4H_s k_F^4} \int_0^{2k_F} dK K^4 I_{\mathbf{H}_s}(K) \ln \left[\frac{H_s^2 + K^2 - 4\Lambda_s^{-1}H_sK}{(H_s - K)^2} \right]. \quad (38a)$$

3. U 过程

除了 $\mathbf{H} = 0$ 以外的基本倒格矢 $\mathbf{H}_U$ 的贡献是 U 过程. 对每一个 $\mathbf{H}_U$, 积分区域是以 $\mathbf{H}_U$ 点为中心的等效布里渊区被 $2k_F$ 球所包含的部分. 所以 $\mathbf{H}_U$ 的贡献与 (35) 式是相似的, 只不过对 K 的积分限有所不同. 用德拜模型时对 K 的积分应从 q_D 开始, ρ_U 可近似表

1) 在球形费密面模型中 $k_F = \left(\frac{3\pi^2}{\Omega_0} Z\right)^{1/3}$, Z 是每原子价电子数. 体心立方结构 $\Omega_0 = a^3/2$, 对单价金属, $2k_F = 7.8/a$.

为

$$\rho_U \simeq \frac{3\pi\hbar\Omega_0 q_D^2}{4e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \left(\frac{T}{\Theta} \right) \frac{\Lambda_U}{2H_U k_F^4} \int_{q_D}^{2k_F} dK K^4 I_{H_U}(K) \cdot \int_{\frac{\Theta}{T} \frac{1}{q_D} (H_U^2 + K^2 - 4\Lambda_U^{-1} H_U K)^{1/2}}^{\frac{\Theta}{T} \frac{1}{q_D} |H_U - K|} \frac{x dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})}, \quad (39)$$

式中 $H_U = |\mathbf{H}_U|$, Λ_U 是等价的 $\mathbf{H}_U$ 的数目. 按照这个式子低温下 ρ_U 也有

$$\rho_U \simeq \rho_{ui} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 \quad (40)$$

的形式,

$$\rho_{ui} = \begin{cases} 0 & \text{若 } 2k_F < H_U, \\ \Lambda_U \frac{\pi^2}{3} \frac{3\pi\hbar\Omega_0 q_D^2}{4e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \left(\frac{q_D}{k_F} \right) \left(\frac{H_U}{k_F} \right)^3 I_{H_U}(H_U) & \text{若 } 2k_F > H_U. \end{cases} \quad (40a)$$

对于单价金属, $2k_F$ 小于 H_U , 所以足够低的温度下 U 过程没有贡献. 但是, 按我们的球形费密面模型, 当 $2k_F$ 大于 H_U 时, U 过程在低温下可能贡献一个 T^2 项. 不过利用这个结果时应当慎重. 因为对于 U 过程, 用球形费密面模型研究其低温贡献并不总是合适的. 在第四节中将讨论这个问题.

当 $T \gg \Theta$ 时, U 过程的贡献为

$$\rho_U \simeq \rho_{u0} \left(\frac{T}{\Theta} \right), \quad (41)$$

$$\rho_{u0} = \frac{3\pi\hbar\Omega_0 q_D^2}{4e^2 M v_F^2 k_B \Theta} \frac{\Lambda_U}{2H_U k_F^4} \int_{q_D}^{2k_F} dK K^4 I_{H_U}(K) \ln \left[\frac{H_U^2 + K^2 - 4\Lambda_U^{-1} H_U K}{(H_U - K)^2} \right]. \quad (41a)$$

四、讨论及与实验比较

我们把文献[1]发展的适用于无序晶态合金的 Ziman 型电阻率理论推广到包含长程有序的替代式合金系统, 在单声子近似下得到了这类系统的电阻率表达式. 所得结果可用于纯金属, 也可用于理想配比或非理想配比的合金.

按照我们的模型, 不仅结构因子中的无序弥散分布项对声子电阻率有贡献, 在长程有序的合金系统中, 超结构布拉格反射峰对声子电阻率也有重要贡献. 由于这个贡献, 即使是完全有序的合金, $T \rightarrow 0\text{K}$ 时的电阻率也会明显高于纯金属. 超结构峰对电阻率的贡献在低温下是按 T^2 变化的, 因而它对有序合金低温电阻率的行为会起重要作用.

自然, 我们的全部结果是在这样一个假定下得到的: 晶态合金中的电子状态, 在广延 $\mathbf{k}$ 空间描述时, 其费密能量附近的等能面可近似于连续的球面. 由于周期势场的存在, 晶态固体中这一点是不可能严格成立的. 按照能带理论, 广延 $\mathbf{k}$ 空间的能量函数 $\varepsilon(\mathbf{k})$ 跨过非零倒格矢 $\mathbf{H}$ 的垂直平分面时一般是不连续的, 在倒格矢 $\mathbf{H}$ 的垂直平分面两边能量的跳跃大致正比于周期势在这个倒格矢处的傅里叶系数 $|V_{\mathbf{H}}|$. 因此, 只要等能面的范围超过合金的基本布里渊区, 一般就不可能是连续的曲面. 但是, 合金的超结构倒格矢 $\mathbf{H}_s$ 处的周期势傅里叶系数 $|V_{\mathbf{H}_s}|$ 一般情况下比基本倒格矢 $\mathbf{H}_U$ 处的周期势傅里叶系数 $|V_{\mathbf{H}_U}|$

小得多,因而能量函数 $\varepsilon(\mathbf{k})$ 越过超结构倒格矢的垂直平分面的跳跃相对来说是小的,只要温度不是非常之低,可以忽略. 因此,如果广延 $\mathbf{k}$ 空间的费密面限于基本倒格矢的垂直平分面围成的最小区域(即合金的大能区)内,在近自由电子模型下把它当作连续的球面应当是合理的近似. 当费密面超过合金的大能区时,能量函数跨过基本倒格矢的垂直平分面的跳跃不一定能够忽略,对于 U 过程,在较低的温度需要认真考虑它的影响;但仅就 S 过程的贡献来说,连续球面的假定仍然是近似可用的. 至于高温情况,已经有许多较短波长的声子激发,电子能量函数的这种不连续性对电阻率的温度行为已没有实质的影响,球形费密面模型能给出合理的结果.

由此可见,至少对于低温下 U 过程不起重要作用的替代式合金,在 $T \ll \Theta$ 但又不是非常低的温度范围,电阻率可近似表为

$$\rho \simeq \rho_0 + \rho_a \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 + \rho_i \left(\frac{T}{\Theta} \right)^5, \quad (42)$$

$$\rho_a = \rho_d + \rho_{si},$$

式中 ρ_0 是剩余电阻; ρ_d 可认为是合金组元无规分布的贡献,在完全有序的合金中 $\rho_d = 0$; ρ_{si} 是超结构反射峰的贡献,不存在长程有序($\eta = 0$)时 $\rho_{si} = 0$. 由此可见,对于一个合金系统,只要各组元的散射矩阵有差异,低温电阻率就会出现按 T^2 变化的项. 所以 T^2 项的存在可以认为是合金电阻率低温行为的一个特征.

在合金系统中电阻率 T^2 项的数值可能是相当大的. 以二元体心立方结构的完全有序合金为例, $(T/\Theta)^2$ 项系数与 $(T/\Theta)^5$ 项系数之比为

$$\frac{\rho_{si}}{\rho_i} \sim 0.04 \left(\frac{H_s}{q_D} \right)^3 \frac{|t_A - t_B|_{H_s}^2}{|\bar{t}_0|^2}.$$

因为 $(H_s/q_D)^3 \sim 1$, 若 $|t_A - t_B|_{H_s}^2/|\bar{t}_0|^2 \sim 0.1$, 则 $\rho_{si}/\rho_i \sim 4 \times 10^{-3}$. 因此在 $(T/\Theta) \lesssim 0.1$ 的温度范围它将起主要作用. 我们知道,电子-电子散射贡献于电阻率的 T^2 项要小得多,只有在低得多的温度(10K 以下)才显现出来^[3].

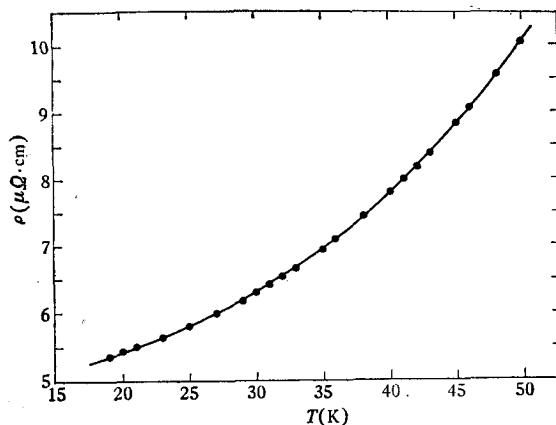


图2 合金低温电阻率公式与 V_3Si 实验值的比较

实验点取自 Milewits et al. (V514), 曲线是

$$\rho = 4.79 + 1.59 \times 10^{-3} T^2 + 4.22 \times 10^{-3} T^5$$

实验上发现许多高 T_c 的 A-15 化合物的低温电阻率完全不符合现有理论的预言. V_3Si ^[4,5], Nb_3Sn , Nb_3Al 和 Nb_3Ge ^[6] 的电阻率从 T_c 到几十 K 的温度范围呈现明显的 T^2 依赖性. 这个反常迄今未见到满意的解释. 而按照我们的模型, 合金电阻率的这种特征是非常容易理解的. (42) 式不但能很好地描述 V_3Si , Nb_3Sn 等高 T_c 的 A-15 化合物, 也能描述 Nb_3Sb 的低温电阻率温度依赖性. 作为例子, 我们在图 2 中划出了用公式

$$\rho = \rho_0 + a_2 T^2 + a_5 T^5$$

适合 Milewits 等人^[3] 的 V_3Si 电阻率测量值 (样品 V 514, 18—50 K) 的理论曲线及部分实验值, 符合是很好的. 可以看到, V_3Si 电阻率中的 T^2 项比非磁性过渡金属中电子-电子散射引起的 T^2 项要大两个数量级^[3]. 注意 V_3Si 的德拜温度 $\Theta \simeq 460$ K^[7], 因而图 2 曲线的 $(T/\Theta)^2$ 项系数与 $(T/\Theta)^5$ 项系数之比大约是 3.9×10^{-3} , 正处于我们估计的易于达到的范围.

附 录

我们证明 (37) 式.

当 $T \ll \Theta$ 时, (36) 式中第二个积分的上限可换为 ∞ ,

$$\rho_s = C \left(\frac{T}{\Theta} \right) \frac{A_s}{2H_s k_F^4} \int_0^{2k_F} dK K^4 I_{H_s}(K) \int_{\frac{\Theta}{T} \frac{1}{q_D} (H_s - K)}^{\infty} \frac{x dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})},$$

这里 $C \equiv 3\pi \hbar Q_0 q_D^2 / (4e^2 M v_F^2 k_B \Theta)$. 令

$$y \equiv \frac{\Theta}{T} \frac{1}{q_D} (H_s - K),$$

将对 K 的积分换为对 y 的积分,

$$\rho_s = C \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 \frac{A_s q_D}{2H_s k_F^4} \int_{\frac{\Theta}{T} \frac{1}{q_D} (H_s - 2k_F)}^{\frac{\Theta}{T} \frac{H_s}{q_D}} dy \int_{|y|}^{\infty} \frac{x dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \left(H_s - \frac{T}{\Theta} q_D y \right)^4 I_{H_s} \left(H_s - \frac{T}{\Theta} q_D y \right).$$

因为第二个积分中被积函数在大 x 值指数趋于零, 对 ρ_s 的主要贡献来自小 $|y|$ 的区域. 所以低温下 ($T \ll \Theta$), 当 $2k_F < H_s$ 时, $\rho_s \approx 0$; 而当 $2k_F > H_s$ 时,

$$\begin{aligned} \rho_s &\simeq C \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 \frac{A_s}{2} \left(\frac{H_s}{k_F} \right)^3 \left(\frac{q_D}{k_F} \right) I_{H_s}(H_s) \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{|y|}^{\infty} \frac{x dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \\ &= C \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 A_s \left(\frac{H_s}{k_F} \right)^3 \left(\frac{q_D}{k_F} \right) I_{H_s}(H_s) \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \\ &= C \frac{\pi^2}{3} A_s \left(\frac{H_s}{k_F} \right)^3 \left(\frac{q_D}{k_F} \right) I_{H_s}(H_s) \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2. \end{aligned}$$

参 考 文 献

- [1] 雷啸霖, 物理学报, 本刊本期.
- [2] 见例如, M. A. Кривоглаз, A. A. Смирнов, *Теория упорядочивающихся сплавов* (Москва, 1958).
- [3] J. T. Schrieffer, *Phys. Rev. Lett.*, **20**(1968), 1034.
- [4] B. A. Марченко, *ФТТ*, **15** (1973), 1893.
- [5] M. Milewits, S. J. Williamson, H. Taub, *Phys. Rev.*, **B13**(1976), 5199.
- [6] G. W. Webb, Z. Fisk, J. J. Engelhardt, S. D. Bader, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2624.
- [7] F. Y. Fradin *et al.*, *Superconductivity in d- and f-band metals* (ed. by D. H. Douglass, Plenum Press), (1976), p. 297.

ELECTRICAL RESISTIVITY OF SUBSTITUTIONAL ALLOYS

LEI XIAO-LIN

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

The Ziman-type resistivity theory developed in reference [1] for disordered crystalline alloys is extended to the systems in which the long range order exists, so that it can be applied to the crystalline pure metals and ordered and disordered substitutional alloys. On the basis of this theory, we have investigated the temperature dependence of the resistivity in these systems within the one-phonon approximation. It is emphasized that the superstructure peaks in the structure factors of alloys would give a significant contribution to their phonon-induced electrical resistivity. On account of its T^2 behavior and its being much larger than that due to electron-electron scattering, the electron-phonon resistivity contributed by superstructure peaks would play an important role in the temperature dependence of resistivity in alloys, which behaves as $\rho \simeq \rho_0 + \rho_a \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 + \rho_i \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5$ in a relatively low temperature range. Therefore the anomaly in low temperature resistivity of some A-15 compounds can easily be explained with our model. As an example, the low temperature expression for resistivity of alloys is fitted to the V₃Si data of Milewits, the theory is found to be in good agreement with experimental results.