

液态金属及非晶态中的电导率 ——相干势近似

张 昭 庆

(中国科学院物理研究所)

1981年3月23日收到

提 要

本文在紧束缚模型内得到了液态金属和非晶态中电子电导率的相干势近似(CPA)结果。用文献[4]提出的处理单格点图形的系统方法可以得到平均双粒子格林函数的近似方程。这里采用具有短程序的点阵-气体模型。液态金属和非晶态金属相对应的CPA方程可以从点阵-气体模型的极限求得。这样得到的自治方程包括所有的单格点图形,具有CPA的所有性质。

一、引 言

自从 Roth^[1] 在 1974 年提出用有效介质(EMA)理论来处理非简单液态金属(如液态过渡或稀土金属)的电子态密度后,这方法被公认为是最好的单格点近似理论。它是替代无序合金里相干势近似(CPA)在结构无序系统自然的推广。但是关于电子输运过程的对应 CPA 方程一直是大家感兴趣的问题。1978 年 Itoh^[2] 等人提出了在紧束缚模型内电导率的近似方程。它是 Ishida 和 Yonezawa^[3] (简称 I-Y) 所提出的单粒子格林函数近似方程的推广,这仍只是 CPA 的第一阶近似。本文将利用作者在文献[4]中所提出的处理单格点图形的系统方法来处理具有短程序的点阵-气体模型^[5] 的平均双粒子格林函数。取这模型的极限可以得到液态金属和非晶态金属相对应的 CPA 方程。最近 Itoh^[6] 等人和 Singh^[7] 等人已分别完成了这方面的工作。Singh 是采用变分的方法,而 Itoh 是采用单粒子格林函数与双粒子格林函数图形对比的方法。本文提出不同的方法,其结果与 Itoh^[6] 他们的结果完全一致。这也可以说明我们所提出的系统处理单格点图形方法的普遍性。

二、点阵-气体模型和平均单粒子格林函数

我们先采用一个点阵-气体模型,在单位体积内有 N 个格点,其中 N_a 个格点有原子占据,其成分为 $c = N_a/N$, 格点能量为 E_0 。在一固定的组态下单电子的哈密顿量为

$$H = \sum_i |i\rangle E_0 \xi_i \langle i| + \sum_{i \neq j} |i\rangle \xi_i t_{ij} \xi_j |j\rangle. \quad (1)$$

上式中 ξ_i 为随机变数, 其值为 1 或 0, 看 i 格点上有无原子占据. t_{ij} 为电子从 j 格点跳到 i 格点的跳跃能. 单粒子格林函数 $\tilde{g}$, 其矩阵元 $\tilde{g}_{ij}$ 和平均单粒子格林函数 G 的对角部分 G_o . 非对角部分 G_{nd} 分别定义为

$$\tilde{g} = [E - H]^{-1}, \quad (2)$$

$$\tilde{g}_{ij} = \langle i | \tilde{g} | j \rangle, \quad (3)$$

$$G = \langle \xi \tilde{g} \xi \rangle_c = G_o + G_{nd}, \quad (4)$$

$$G_o = \langle \xi_i \tilde{g}_{ii} \rangle_c, \quad (5)$$

$$(G_{nd})_{ij} = \langle \xi_i \tilde{g}_{ij} \xi_j \rangle_c \quad i \neq j. \quad (6)$$

上式中 $\langle \rangle_c$ 是对所有组态取平均. 定义 $g_o = (E - E_o)^{-1}$, 利用 $\xi_i \tilde{g}_{ij} \xi_j$ 的下列展开形式:

$$\begin{aligned} \xi_i \tilde{g}_{ij} \xi_j &= g_o \xi_i \delta_{ij} + g_o \xi_i t_{ij} \xi_j g_o (1 - \delta_{ij}) \\ &+ g_o \xi_i \sum_{m(\neq i, j)} t_{im} g_o \xi_m t_{mj} \xi_j g_o + \cdots, \end{aligned} \quad (7)$$

在单格点近似下可以得到^[4]

$$\begin{aligned} G_o &= c [g_o + g_o^2 U_o(G_o) + g_o^3 U_o^2(G_o) + \cdots] \\ &= c g_o + U_o(G_o) G_o g_o. \end{aligned} \quad (8)$$

而 $U_o(G_o)$ 可以用图 1 的展开形式来表示.

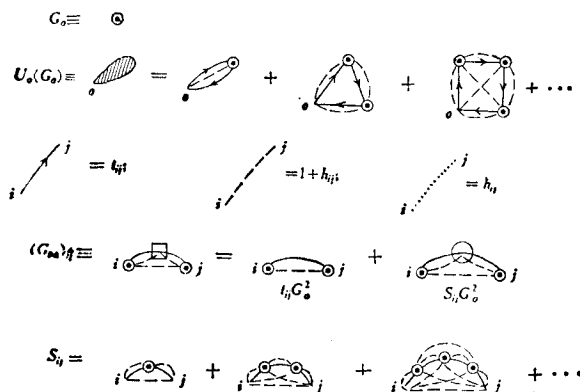


图 1

在图 1 的 U_o 图中所有中间经过的格点有一重整化的 G_o 并对所有格点求和. $(i-j)$ 之间的虚线在这里代表径向分配函数 $g(r_{ij})$, 而 $(i-j)$ 之间的点线则代表全相关函数 $h(r_{ij})$ 或简写为 h_{ij} , 它们之间的关系为 $g(r_{ij}) = 1 + h_{ij}$. 在不具有短程序时, $h_{ij} = -\delta_{ij}$. 我们现在可以用文献 [4] 提出的取单格点图形自洽方程的方法来处理. 也就是系统地将一部分 $(1+h_{ij})$ 的乘积展开, 并将任何两条 h_{ij} , h_{kl} 交叉的图形均省略, 而得到的自洽方程. 这方法在文献 [4] 中详细解释过, 现在我们直接将对 G_{nd} 分解的结果用图 2 表示. 对图形的表示法, 可参考文献 [4].

在图 2 中 σ 的矩阵元为 $\sigma_{ij} = T_{ij} h_{ij}$, S , T , $\tilde{S}'$ 可用算子的形式表示为

$$S = T + \sigma, \quad (9)$$

$$T = \tilde{S}' + (\tilde{I} + S) G_o \sigma, \quad (10)$$

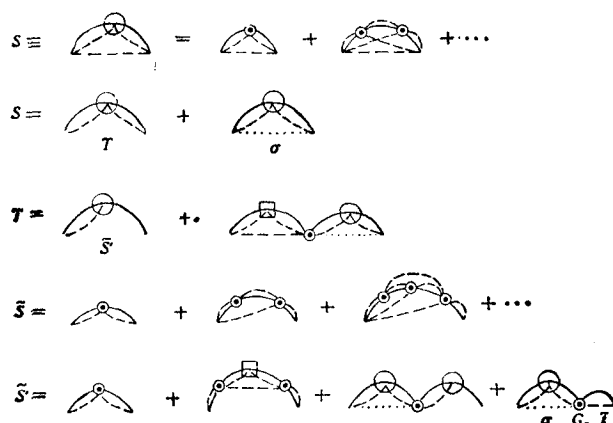


图 2

$$\tilde{S}' = \tilde{t}G\tilde{t} + \sigma G_o(\tilde{t} + \tilde{S}'). \quad (11)$$

在上式中令 $\tilde{t}_{ij} = t_{ij}g(r_{ij})^{[9]}$. 现在将 S_{ij} , T_{ij} , σ_{ij} , $\tilde{S}_{ij}$, $\tilde{t}_{ij}$, G_{ij} , h_{ij} 等作傅氏变换

$$\chi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}}, \quad (12)$$

并令其对应的函数分别为 $S(\mathbf{k})$, $T(\mathbf{k})$, $\sigma(\mathbf{k})$, $\tilde{S}'(\mathbf{k})$, $\tilde{e}(\mathbf{k})$, $G_{\mathbf{k}}$, $h(\mathbf{k})$, 则 (9)—(11) 式可写为

$$S(\mathbf{k}) = T(\mathbf{k}) + \sigma(\mathbf{k}), \quad (13a)$$

$$T(\mathbf{k}) = \tilde{S}'(\mathbf{k}) + [\tilde{e}(\mathbf{k}) + S(\mathbf{k})]G_o\sigma(\mathbf{k}), \quad (13b)$$

$$\tilde{S}'(\mathbf{k}) = \tilde{e}(\mathbf{k})G_{\mathbf{k}}\tilde{e}(\mathbf{k}) + \sigma(\mathbf{k})G_o(\tilde{e}(\mathbf{k}) + \tilde{S}'(\mathbf{k})). \quad (13c)$$

(13a)—(13c) 式可解得

$$G_o[\tilde{e}(\mathbf{k}) + S(\mathbf{k})] = \left[\frac{G_o}{1 - \sigma(\mathbf{k})G_o} \right]^2 [\tilde{e}^2(\mathbf{k})G_{\mathbf{k}} + \tilde{e}(\mathbf{k})] - G_o + \frac{G_o}{1 - \sigma(\mathbf{k})G_o}. \quad (14)$$

将下式做傅氏变换:

$$G = G_o + G_o^2(\tilde{t} + S), \quad (15a)$$

可得

$$G_{\mathbf{k}} = G_o + G_o^2[\tilde{e}(\mathbf{k}) + S(\mathbf{k})]. \quad (15b)$$

将 (15b) 式代入(14)式可得

$$G_{\mathbf{k}} = \frac{1}{G_o^{-1} - \sigma(\mathbf{k}) - \tilde{e}(\mathbf{k})}. \quad (16)$$

利用图 2 中 $\sigma_{ij} = T_{ij}h_{ij}$ 的关系, 并做傅氏变换可得

$$\sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} h(\mathbf{k} - \mathbf{k}')T(\mathbf{k}'). \quad (17)$$

从(13a)和(15b)式求得

$$T(\mathbf{k}) = \frac{[\sigma(\mathbf{k}) + \tilde{e}(\mathbf{k})]^2}{G_o^{-1} - [\sigma(\mathbf{k}) + \tilde{e}(\mathbf{k})]}. \quad (18)$$

同样可以将图 1 中 $U_o(G_o)$ 的图形对连接 o 点所有的虚线展开并取单格点图, 可得到图 3 的等式.

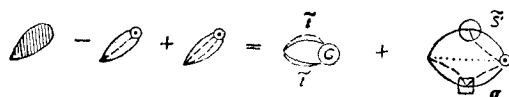


图 3

图 3 中的 G 为 G_o 与 G_{nd} 图的总和. 这等式可写为

$$\begin{aligned} U_o(G_o) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})\epsilon(\mathbf{k})G_o - \tilde{\epsilon}^2(\mathbf{k})G_o] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{\epsilon}^2(\mathbf{k})G_{\mathbf{k}} + \tilde{S}'(\mathbf{k})G_o\sigma(\mathbf{k})]. \end{aligned} \quad (19)$$

上式中 $\epsilon(\mathbf{k})$ 为 t_{ij} 的傅氏变换. 利用 (13b), (15b) 和 (18) 式可得

$$\tilde{S}'(\mathbf{k}) = \frac{[\sigma(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})]\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{G_o^{-1} - [\sigma(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})]}. \quad (20)$$

将上式代入 (19) 式并利用 (16) 式, 经过一些运算后 U_o 可写为

$$U_o(G_o) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})\epsilon(\mathbf{k}) + \frac{[\sigma(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})]^2 \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) G_o}{G_o^{-1} - [\sigma(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})]} \right]. \quad (21)$$

(17), (18) 式和 (8), (21) 式正分别是 Yonezawa 和 Watabe^[5] 文献中的 (4.8) 和 (4.11) 式. 所以我们一样可以用这分解的方法得到单粒子格林函数的 CPA 方程.

三、电导率的 CPA 方程

在没有外加磁场下, 直流电导率的 Kubo 公式可写为

$$\sigma_o = \frac{2\pi e^2}{3\hbar} \int dE \left(\frac{-\partial f(E)}{\partial E} \right) D(E), \quad (22)$$

$$D(E) = D(E^+, E^+) - D(E^+, E^-) - D(E^-, E^+) + D(E^-, E^-), \quad (23)$$

$$E^+ = E + i\eta, \quad E^- = E - i\eta, \quad (24)$$

$$\text{而} \quad D(y, z) = \frac{-1}{4\pi^2} Y(y, z), \quad (25)$$

$$Y(y, z) = \left\langle \sum_{m, n, k, l} \mathbf{r}_{mn} t_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nl}(y) \xi_l \cdot \mathbf{r}_{lk} t_{lk} \xi_k \tilde{g}_{km}(z) \xi_m \right\rangle_c. \quad (26)$$

(22) 式中的 f 为费密分配函数, η 为无限小的正数. 可定义 H_{mn} 和 $\tilde{H}_{mn}$ 为

$$\begin{aligned} H_{mn} &= \mathbf{r}_{mn} t_{mn}, \\ \tilde{H}_{mn} &= \mathbf{r}_{mn} \tilde{t}_{mn}. \end{aligned} \quad (27)$$

(26) 式可以根据 m, n, k, l 不同的情况分成下列七种形式:

1) m, n, k, l 全不等时

$$\begin{aligned} Y_1(y, z) &= \sum_{m, n, k, l} \langle \tilde{H}_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nl}(y) \xi_l \cdot \tilde{H}_{lk} \xi_k \tilde{g}_{km}(z) \xi_m \rangle_c \\ &\quad \times (1 - \delta_{mk})(1 - \delta_{nl})(1 - \delta_{nk})(1 - \delta_{ml}). \end{aligned} \quad (28)$$

2) $m = k$, 其他不等

$$Y_2(y, z) = \sum_{m, n, l} \langle \tilde{H}_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nl}(y) \xi_l \cdot \tilde{H}_{lm} \tilde{g}_{mm}(z) \xi_m \rangle_c (1 - \delta_{nl}). \quad (29)$$

3) $n = l$, 其他不等

$$Y_3(y, z) = \sum_{m, n, k} \langle \tilde{H}_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nn}(y) \cdot H_{nk} \xi_k \tilde{g}_{km}(z) \xi_m \rangle_c (1 - \delta_{nk}). \quad (30)$$

4) $n = k$, 其他不等

$$Y_4(y, z) = \sum_{m, n, l} \langle \tilde{H}_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nl}(y) \xi_l \cdot \tilde{H}_{ln} \tilde{g}_{nm}(z) \xi_m \rangle_c (1 - \delta_{ml}). \quad (31)$$

5) $l = m$, 其他不等

$$Y_5(y, z) = \sum_{m, n, k} \langle \tilde{H}_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nm}(y) \xi_m \cdot \tilde{H}_{mk} \xi_k \tilde{g}_{km}(z) \rangle_c (1 - \delta_{kn}). \quad (32)$$

6) $m = k$, $l = n$, 其他不等

$$Y_6(y, z) = \sum_{m, n} \langle \tilde{H}_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nn}(y) \cdot H_{nm} \xi_m \tilde{g}_{mm}(z) \rangle_c. \quad (33)$$

7) $n = k$, $m = l$, 其他不等

$$Y_7(y, z) = \sum_{m, n} \langle \tilde{H}_{mn} \xi_n \tilde{g}_{nm}(y) \xi_m \cdot H_{nm} \tilde{g}_{nm}(z) \rangle_c. \quad (34)$$

我们将(7)式代入(28)–(34)式, 展开后 Y_2 至 Y_7 的单格点图形可表示在图4中^[4] 图4(i)或 γ 是文献[4]的(27式), 这里我们取 $E_A \rightarrow \infty$ 的极限, 自然可得到 $\gamma =$

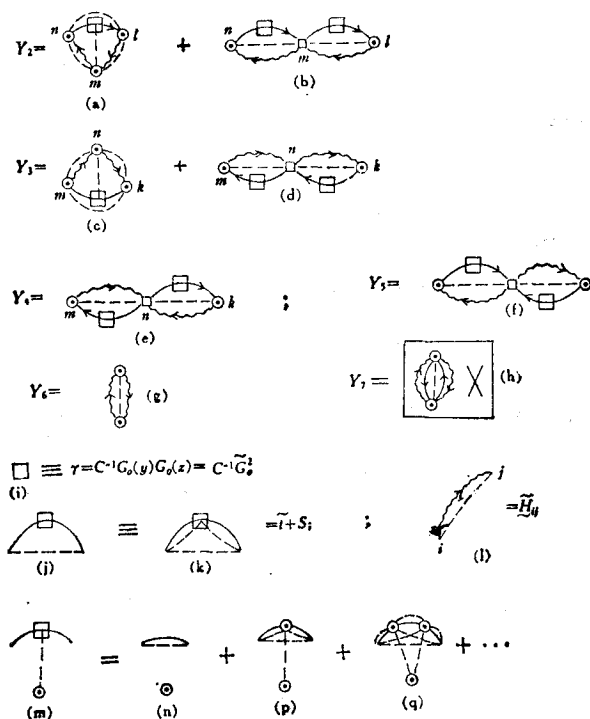


图 4

$c^{-1}G_o(y)G_o(z)$, 并简写为 $c^{-1}\tilde{G}_o^2$. 现在将所有的 δ_{ij} 都以 $-h_{ij}$ 取代. 在图 4 中每个图上面传播子是电子, 其能量为 y , 下面传播子是空穴, 其能量为 z . 以后将省去传播子的箭头. 为了简单, 我们用 4(j) 的图来代表以前所用的 4(k) 图, 省去了连接中间方格与两顶端的虚线. Y_7 在单格点近似下可以省略, 因为第一项的展开 4(h) 图即非单格点图. Y_1 的单格点图可由图 5 表示.

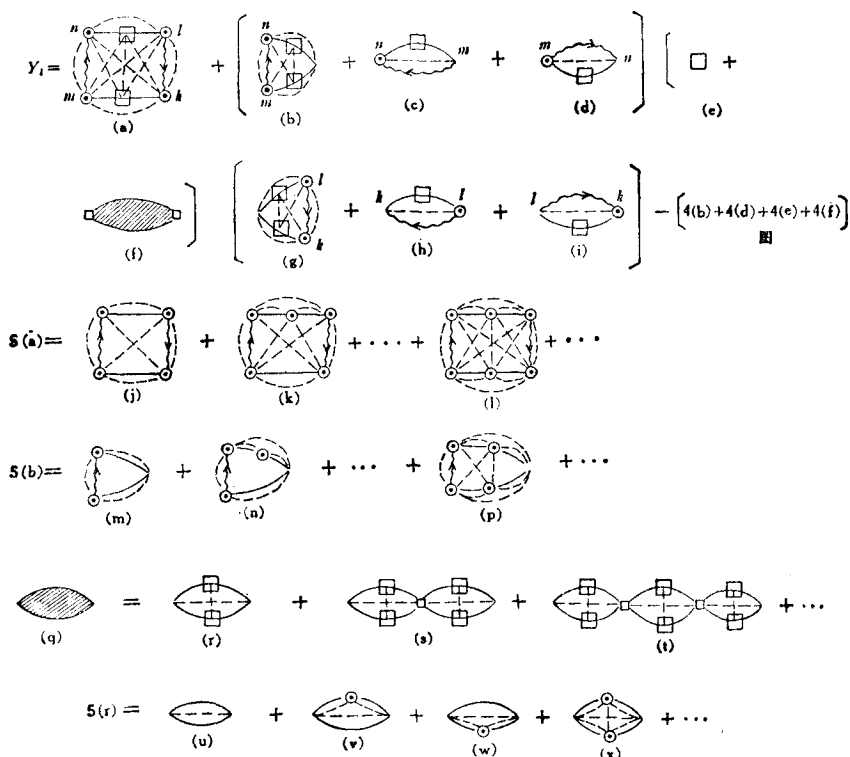


图 5

现在我们必须将图 4 (a), (c) 和图 5 (a), (b), (f), (g) 逐步利用分解的方式找出它们的单格点自洽方程, 并将 Y_1-Y_6 重新整理. 先将图 5(r) 上下连接 $G_o(y)$ 与 $G_o(z)$ 之间的虚线从左至右展开. 其自洽方程表示在图 6 的第一行. 而图 6(b) 的右边部分与图 5(b) 类似. 再将图 6(b) 中所有连接 $(s-b)$ 及 $(p-a)$ 之间的虚线展开, 可得图 6(c) — (g). 这正是图 6(c) (或写为 $V_{p,q,s}$) 的单格点自洽方程. 从这方程可求出 $V_{p,q,s}$, 从而得 R_{jl} (图 5(r)) 及图 5(q), (b), (g) 的值.

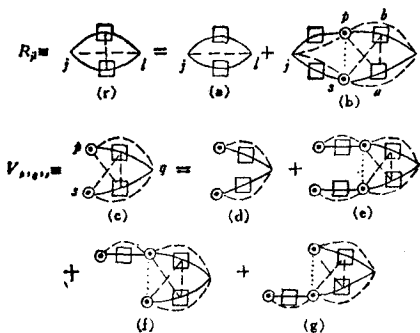


图 6

对图 5(a), 先将 $(n-k)$, $(m-l)$ 之间的虚线展开, 可得图 7(a) — (c). 再将图 7(a) 中连接 $(m-a)$, $(n-b)$ 之间以及 $(k-a)$ — $(l-b)$ 之间的虚线展开, 可得图 7(d) — (h). 图 7(d) 中 $(p-k)$ 之间的虚线可展开为 7(i) 与 7(j)

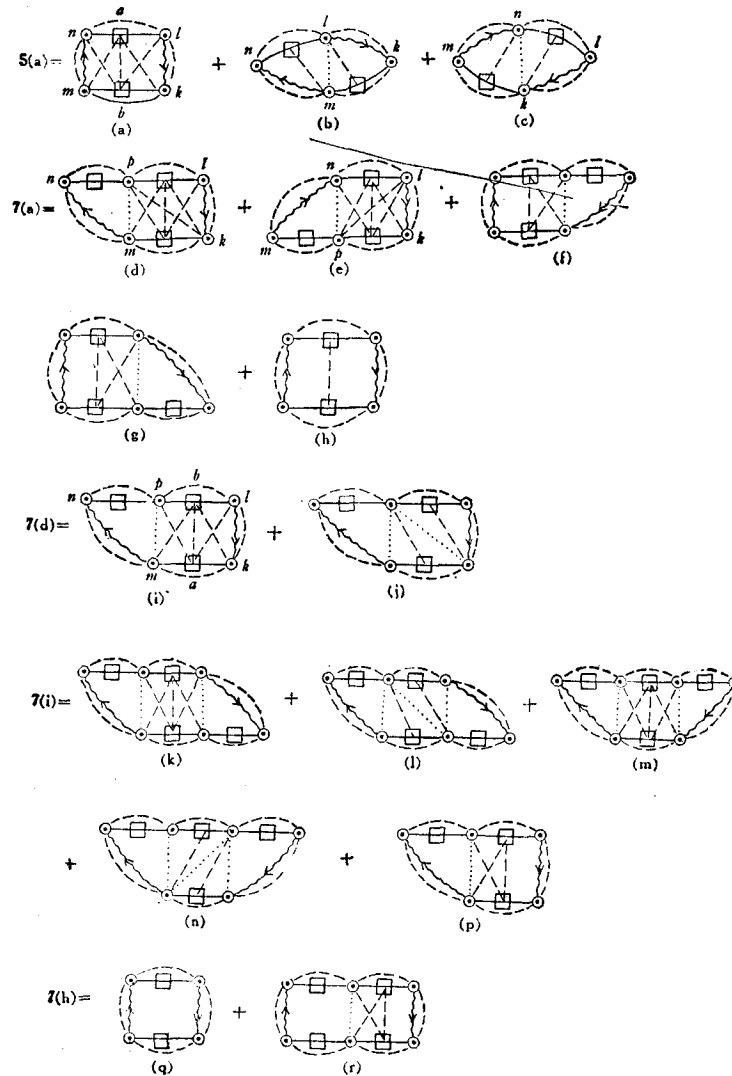


图 7

两图。为了得到对称的图形,再将图 7(i) 中连接 $(k-b)$ 及 $(l-a)$ 之间的虚线展开,可得图 7(k)–(p) 五个图。最后,图 7(h) 也可展开为图 7(q)–(r) 两个图。同样,也可以将图 7(c) 做与图 7(d) 类似的展开。

为了得到对称的图形,我们再将图 4(m) 分解为图 8(a) 及 (b) 两图。图 8(b) 又可再分解为图 8(c), (d) 两图。图 7(f), (g), (p) 中非对称的部分,如图 8(e) 所示,也可按同样方法分解为图 8(f)–(k) 5 个图。

将图 8 中 4(m) 图的展开式代入图 4(a), 4(c), 7(b), 7(c) 等中,图 8(e) 代入图 7(f), 7(g), 7(p) 及 7(e) 经分解后对应于图 7(p), 并将图 6(c) 代入图 5(b), 5(g) 中,经过整理后,可将 $\sum_{i=1}^6 Y_i$ 的图以左右对称的形式总括在图 9 中。

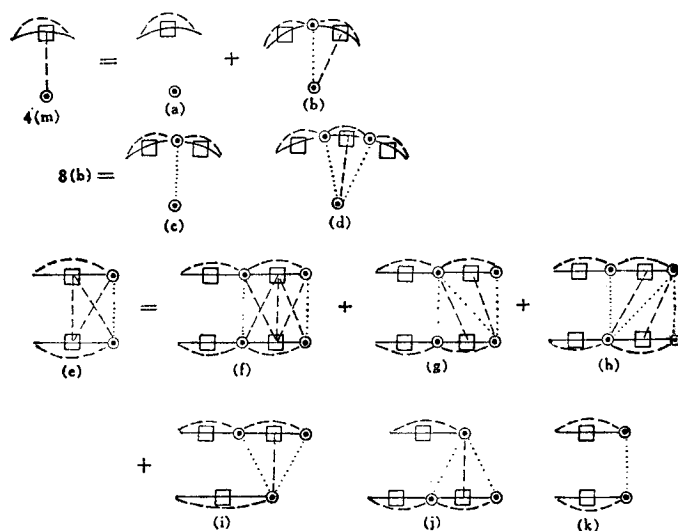


图 8

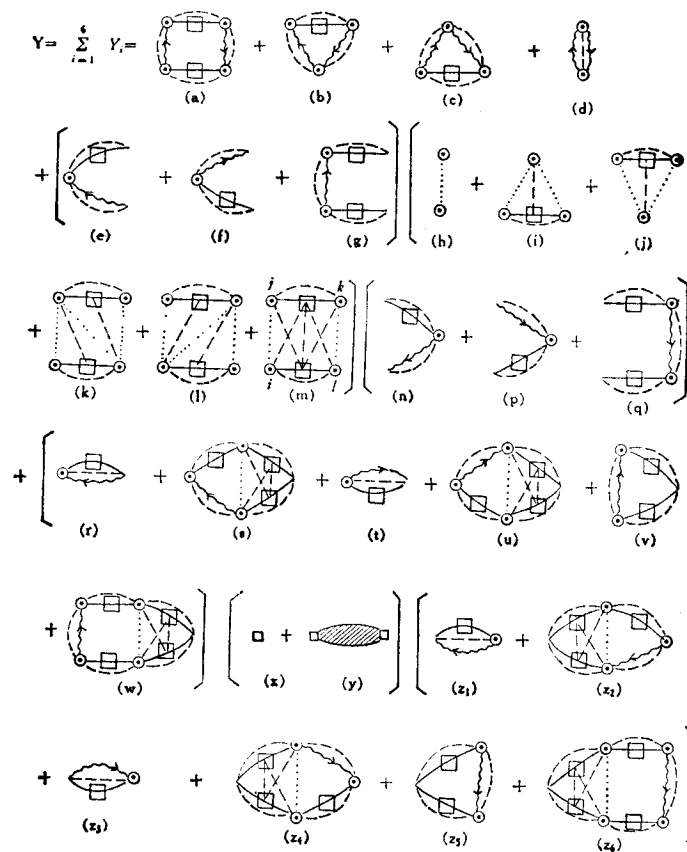


图 9

图 9(i)–(e) 可由图 8 中 4(m) 图的自洽方程所决定. 图 9(s), (u), (w), (y), (z₂), (z₄) 及 (z₆) 可由图 6(c) 的自洽方程所决定. 而图 9(m) 可以由图 10(a)–(f) 的自洽方程来决定. 这自洽方程是将图 10(a) 中连接 (i–a) 和 (j–b) 之间的虚线展开而得到的. 这方程与图 8(c) 的自洽方程耦合而决定图 9(m). 注意, 在图 9 中每一个图的任何一个顶角都是对所有的格点求和. 若将以上所得到的自洽方程无穷的展开, 很容易看出它们包括了所有的单格点图形, 这是 CPA 最主要的性质. 以上就是本文主要的结果. 在设有短程序时, $h_{ij} = -\delta_{ij}$, 又因为 $(\tilde{i} + S)_{ii} = 0$, 所以图 9(i), (j), (k), (l) 等图均为零. 图 9(h), (m) 的和可写为

$$-[\tilde{G}_0^2 - \tilde{G}_0^2 R \tilde{G}_0^2] = -M \tilde{G}_0^2. \quad (35)$$

上式中 R 为图 9(m) 将 i, j 点和 k, l 点合并后的图. 同样将图 9(s) 中间的虚线合并并改为负值, 则

$$\text{图 } 9(r) + 9(s) = \text{图 } 9(r) \times [1 - \tilde{G}_0^2 R] = \text{图 } 9(r) \times M. \quad (36)$$

同样我们可将图 9(u), (w), (z₂), (z₄), (z₆) 等图中间的虚线合并. 最后图 9(c)–(z₆) 的总和为

$$\begin{aligned} & \text{图 } [9(e) + 9(f) + 9(g)] \left[M \frac{\gamma}{1 - R\gamma} M - \tilde{G}_0^2 M \right] \text{图 } [9(n) \\ & + 9(p) + 9(q)]. \end{aligned} \quad (37)$$

上式中还用到图 5(q) 的展开式. (37) 式正是文献[4]中 CPA 的结构. γ 在这里为 $c^{-1} \tilde{G}_0^2$. 所以本文的结果是文献[4]的自然推广. 第五节中将比较图 9 的结果与 Itoh^[6] 等人的结果, 并证明它们是一致的.

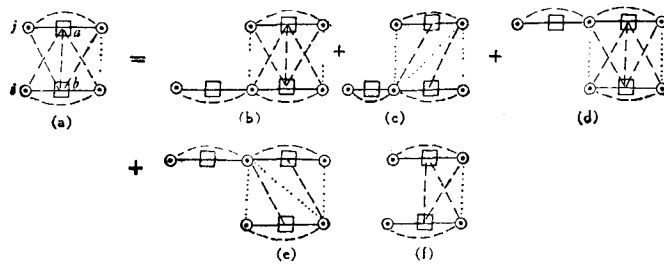


图 10

为了将图 9 及其对应的自洽方程以较简单的方式表示, 我们再将图 9 中的图 9(h)–(m) 做自洽运算. 先将图 9(m) 利用图 10 的等式代入, 再将图 10(f) 利用图 8(c) 的等式代入. 最后将图 8(f)–(h) 左端的部分 $(\tilde{i} + S)_{ij}(\tilde{i} + S)_{kl}$ 用 $(G - G_0)_{ij}(G - G_0)_{kl}$ 表示, 并将它展开如图 11(a)–(c) 所示. 这时若将图 9(h)–(m) 相加并令它等于 I , 用图 11(g) 表示可以得到 I 的自洽方程见图 11(h)–(k).

定义 $I_{ij,kl}$ 的傅氏变换为

$$\begin{aligned} I_{ij,kl} &= \frac{1}{N^4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} I(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \\ &\times \exp[i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_i + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j + \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{R}_k + \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{R}_l)]. \end{aligned} \quad (38)$$

若令

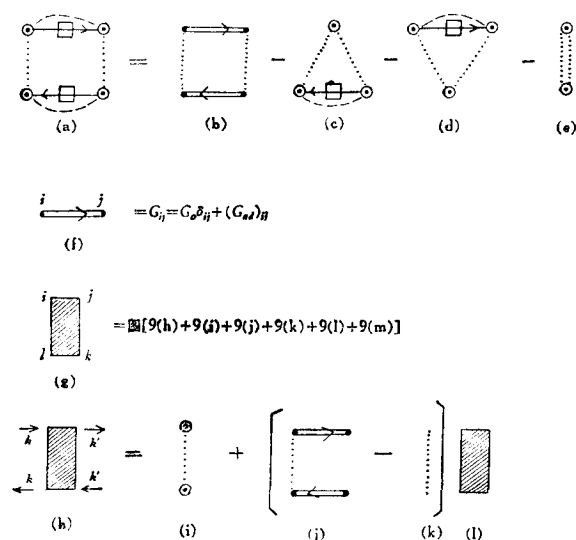


图 11

$$\mathcal{L}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv I(\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{k}', -\mathbf{k}), \quad (39)$$

则图 11(h)–(k) 的方程在动量空间可以表示为

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= N h(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \tilde{G}_o^2 \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} h(\mathbf{k} - \mathbf{q}) [G_{\mathbf{q}}(y) G_{\mathbf{q}}(z) - \tilde{G}_o^2] \tilde{G}_o^{-2} \mathcal{L}(\mathbf{q}, \mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (40)$$

在图 9 中 (n), (p) 及 9(q) 在动量空间分别为

$$9(\mathbf{n}) \rightarrow G_o^{-1}(y) [G_{\mathbf{k}}(y) - G_o(y)] \tilde{H}(\mathbf{k}), \quad (41)$$

$$9(\mathbf{p}) \rightarrow G_o^{-1}(z) [G_{\mathbf{k}}(z) - G_o(z)] \tilde{H}(\mathbf{k}), \quad (42)$$

$$9(\mathbf{q}) \rightarrow \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{k}}(y) - G_o(y)] [G_{\mathbf{k}}(z) - G_o(z)] \tilde{H}(\mathbf{k}), \quad (43)$$

其和可写为

$$P(\mathbf{k}) = \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{k}}(y) G_{\mathbf{k}}(z) - \tilde{G}_o^2] \tilde{H}(\mathbf{k}). \quad (44)$$

若令

$$M(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{L}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') P(\mathbf{k}'), \quad (45)$$

在(40)式两边乘上 $N^{-1} P(\mathbf{k}')$ 并对 $\mathbf{k}'$ 求和, 可得

$$\begin{aligned} M(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} h(\mathbf{k} - \mathbf{k}') [G_{\mathbf{k}'}(y) G_{\mathbf{k}'}(z) - \tilde{G}_o^2] \tilde{H}(\mathbf{k}') \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} h(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{q}}(y) G_{\mathbf{q}}(z) - \tilde{G}_o^2] M(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (46)$$

图 9(e)–(q) 的总和可写为

$$B = [9(\mathbf{e}) + \cdots + 9(\mathbf{q})] \text{ 图} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k}) \cdot M(\mathbf{k}). \quad (47)$$

(40)或(46)式可称为非对角顶点的 CPA 方程。

现在我们将图 6(e) 左边的 $(\tilde{z} + S)_{ij}(\tilde{z} + S)_{kj}$ 用图 11(a)–(e) 的方程式代入, 从图

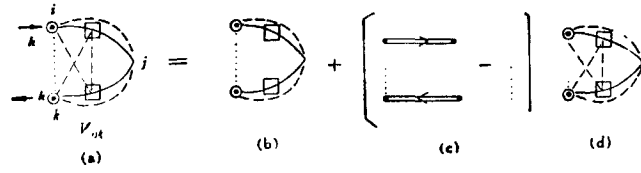


图 12

6(c)–(g) 可得到图 12 的方程式. 定义图 12(a) $V_{ij,k}$ 的傅氏变换 $V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ 为

$$V_{ij,k} = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \exp[i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_i + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j + \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{R}_k)], \quad (48)$$

再令

$$J(\mathbf{k}) = V(\mathbf{k}, 0, -\mathbf{k}), \quad (49)$$

则图 12(a)–(d) 可表示为

$$\begin{aligned} J(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{q}} h(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{q}}(y) - G_o] [G_{\mathbf{q}}(z) - G_o] \\ &\quad + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} h(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{q}}(y) G_{\mathbf{q}}(z) - \tilde{G}_o^2] J(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (50)$$

(50) 式是对角顶点的 CPA 方程.

按 (12) 式的定义令 $R(\mathbf{k})$ 为图 6 中 R_{il} 的傅氏变换, 若将图 6(a), (b) 也做傅氏变换, 则有下列方程:

$$\begin{aligned} R(0) &= \sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{k}}(y) - G_o(y)] [\varepsilon(\mathbf{k}) + T(\mathbf{k}, z)] \\ &\quad + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{k}}(y) - G_o(y)] [G_{\mathbf{k}}(z) - G_o(z)] J(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (51)$$

上式中 $T(\mathbf{k}, z)$ 为 (18) 式的 $T(\mathbf{k})$, z 代表空穴的能量 z . 与图 9(n), (p), (q) 类似, 图 9(r), (t), (v) 在动量空间可将其总和写为

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{k}) &= H(\mathbf{k}) G_o^{-1}(y) [G_{\mathbf{k}}(y) - G_o(y)] \\ &\quad + H(\mathbf{k}) G_o^{-1}(z) [G_{\mathbf{k}}(z) - G_o(z)] \\ &\quad + \tilde{H}(\mathbf{k}) \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{k}}(y) - G_o(y)] [G_{\mathbf{k}}(z) - G_o(z)]. \end{aligned} \quad (52)$$

同样图 9(s), (u), (w) 也可直接利用 (49) 式写出. 最后利用图 5(q) 将图 9(r)–(z₆) 的总和写为

$$\begin{aligned} C &= \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} Q(\mathbf{k}) + \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{H}(\mathbf{k}) \tilde{G}_o^{-2} [G_{\mathbf{k}}(y) G_{\mathbf{k}}(z) \right. \\ &\quad \left. - \tilde{G}_o^2] J(\mathbf{k}) \right]^2 \left[\frac{N\gamma}{1 - \frac{1}{N} R(0)\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (53)$$

至于图 9(a)–(d), 我们立刻可将其总和写为

$$\begin{aligned} A &= \sum_{\mathbf{k}} \{ \tilde{H}(\mathbf{k}) \cdot \tilde{H}(\mathbf{k}) G_{\mathbf{k}}(y) G_{\mathbf{k}}(z) \\ &\quad + [H(\mathbf{k}) \cdot H(\mathbf{k}) - \tilde{H}(\mathbf{k}) \cdot H(\mathbf{k})] \tilde{G}_o^2 \}. \end{aligned} \quad (54)$$

至此在点阵气体模型上 Y [(26)式] 的计算形式已全部完成, 其总值为 $Y = A + B + C$. 而 (50) 和 (46) 式分别为顶点修正中对角和非对角的 CPA 方程.

四、点阵-气体模型的极限——液态金属

现在我们将点阵-气体模型单位体积的格点数变成无限大, 而原子占有数 N_s 固定, 这时 $c \rightarrow 0$, 这就是连续空间的液态金属系统. 定义密度 $\rho = N_s/Q = N_s(Q=1)$, 则 $N^{-1} = N_s/(NN_s) = c/\rho$. 按照 Y-W^[5] 的办法, 做如下的变换:

$$\sum_i \rightarrow \frac{\rho}{c} \int d\mathbf{R}_i, \quad (55)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{c}{\rho} d\mathbf{k}, \quad (56)$$

(12) 式变为

$$\chi_{ij} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \bar{\chi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}}, \quad (57)$$

$$\bar{\chi}(\mathbf{k}) = \frac{c}{\rho} \chi(\mathbf{k}). \quad (58)$$

从 (58) 式可以得到对应于 $h(\mathbf{k})$, $\epsilon(\mathbf{k})$, $\bar{\epsilon}(\mathbf{k})$, $\sigma(\mathbf{k})$, $T(\mathbf{k})$, $H(\mathbf{k})$, $\tilde{H}(\mathbf{k})$ 的 $\bar{h}(\mathbf{k})$, $\bar{\epsilon}(\mathbf{k})$, $\bar{\epsilon}_s(\mathbf{k})$, $\bar{\sigma}(\mathbf{k})$, $\bar{T}(\mathbf{k})$, $\bar{H}(\mathbf{k})$, $\bar{H}_s(\mathbf{k})$. 而格林函数的变换为

$$\bar{G}_o = \frac{\rho}{c} G_o, \quad \bar{G}_s = \frac{\rho}{c} G_s, \quad \bar{G}_o^2 = \left(\frac{\rho}{c}\right)^2 \tilde{G}_o^2. \quad (59)$$

在液态金属中对应的单粒子格林函数的 CPA 方程可从 (17), (18) 式和 (8), (21) 式按 (55)–(59) 式的方法变换得到. 这也就是 Y-W^[5] 的 (5.11) 和 (5.12) 式. 电导率的 CPA 方程变换如下. (54) 式可直接改写为

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \bar{H}_s(\mathbf{k}) \cdot \bar{H}_s(\mathbf{k}) \bar{G}_s(\mathbf{y}) \bar{G}_s(\mathbf{z}) \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} [\bar{H}_s(\mathbf{k}) \cdot \bar{H}(\mathbf{k}) - \bar{H}_s(\mathbf{k}) \cdot \bar{H}_s(\mathbf{k})] \bar{G}_o^2. \end{aligned} \quad (60)$$

令

$$\bar{M}(\mathbf{k}) = M(\mathbf{k}), \quad (61)$$

(46) 式可写为

$$\begin{aligned} \bar{M}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' \bar{h}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') [\bar{G}_{\mathbf{k}'}^2 \bar{G}_{\mathbf{k}'}(\mathbf{z}) - \bar{G}_o^2] \bar{H}_s(\mathbf{k}') \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \bar{h}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \bar{G}_o^2 [\bar{G}_{\mathbf{q}}(\mathbf{y}) \bar{G}_{\mathbf{q}}(\mathbf{z}) - \bar{G}_o^2] \bar{M}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (62)$$

(47) 式可写为

$$\bar{B} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \bar{G}_o^{-2} [\bar{G}_{\mathbf{k}}(\mathbf{y}) \bar{G}_{\mathbf{k}}(\mathbf{z}) - \bar{G}_o^2] \bar{H}_s(\mathbf{k}) \cdot \bar{M}(\mathbf{k}). \quad (63)$$

若令 $\bar{J}(\mathbf{k}) = \frac{c}{\rho} J(\mathbf{k})$, 将 (50) 式两边乘上 c/ρ , 则可得

$$\begin{aligned}\bar{J}(\mathbf{k}) = & \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \bar{h}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \bar{G}_o^2[\bar{G}_q(y) - \bar{G}_o(y)][\bar{G}_q(z) - \bar{G}_o(z)] \\ & + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \bar{h}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \bar{G}_o^2[\bar{G}_q(y) \bar{G}_q(z) - \bar{G}_o^2] \bar{J}(\mathbf{q}).\end{aligned}\quad (64)$$

令 $\bar{R}(0) = \left(\frac{c}{\rho}\right)^2 R(0)$, 将(51)式两边乘上 $(c/\rho)^2$, 可得

$$\begin{aligned}\bar{R}(0) = & \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} [\bar{G}_o(y)]^2 [\bar{G}_k(y) - \bar{G}_o(y)][\bar{e}(\mathbf{k}) + \bar{T}(\mathbf{k}, z)] \\ & + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \bar{G}_o^4 [\bar{G}_k(y) - \bar{G}_o(y)][\bar{G}_k(z) - \bar{G}_o(z)] \bar{J}(\mathbf{k}).\end{aligned}\quad (65)$$

令 $\bar{Q}(\mathbf{k}) = Q(\mathbf{k}) \frac{c}{\rho}$, 则(52)式可写为

$$\begin{aligned}\bar{Q}(\mathbf{k}) = & \bar{H}(\mathbf{k}) \bar{G}_o^{-1}(y) [\bar{G}_k(y) - \bar{G}_o(y)] + \bar{H}(\mathbf{k}) \bar{G}_o^{-1}(z) [\bar{G}_k(z) \\ & - \bar{G}_o(z)] + \bar{H}_g \bar{G}_o^{-2} [\bar{G}_k(y) - \bar{G}_o(y)][\bar{G}_k(z) - \bar{G}_o(z)].\end{aligned}\quad (66)$$

$N\gamma$ 可写为 $\bar{\gamma}$,

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{\rho} \bar{G}_o^2 = \frac{\rho}{c^2} \tilde{G}_o^2 = \frac{N}{c} \tilde{G}_o^2 = N\gamma. \quad (67)$$

同样,

$$\frac{1}{N} R(0)\gamma = \frac{1}{N^2} R(0)\bar{\gamma} = \left(\frac{c}{\rho}\right)^2 R(0)\bar{\gamma} = \bar{R}(0)\bar{\gamma}. \quad (68)$$

最后可将(53)式写为

$$\bar{C} = \left[\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} [\bar{Q}(\mathbf{k}) + \bar{H}_g(\mathbf{k}) \bar{G}_o^{-2} [\bar{G}_k(y) \bar{G}_k(z) - \bar{G}_o^2] \bar{J}(\mathbf{k})]^2 \left[\frac{\bar{\gamma}}{1 - \bar{R}(0)\bar{\gamma}} \right] \right]. \quad (69)$$

(26)式Y的值, 则为 $\bar{Y} = \bar{A} + \bar{B} + \bar{C}$. 而(62)及(64)式为 CPA 方程.

以上我们完成了在液态金属或非晶态金属中电导率的 CPA 方程. 如果我们只考虑简单的具有球形对称的单带模型, 由于 $\bar{H}(\mathbf{k})$ 及 $\bar{H}_g(\mathbf{k})$ 的空间反对称以及 G_k 的对称性, 可以证明 $\bar{J}(\mathbf{k})$ 也是空间对称, 而且(69)式为零, 没有对角顶点的修正. 而非对角顶点的修正(63)式, 可以用球形对称的关系进一步简化. 上面推导的方法可以推广到求 $\mathbf{q} \neq 0$ 的电导率, 也可以推广到多重能带模型上^[6].

五、与 Itoh 等人的工作的比较

Itoh 等人^[6]最近用不同的方法也得到了 CPA 方程. 他们利用平均单粒子格林函数对角和非对角图形与平均双粒子格林函数对角的顶点修正与非对角的顶点修正的图形比较而得到了 CPA 方程. 因为处理方法的不同, 我们得到的最后形式(62)及(64)式与他们的方程形式不同. 但是我们可以从图形上证明其结果是完全一致的.

因为在他们文章中傅氏变换与我们的定义相差一个 ρ 因子, 我们将这考虑后, 可以将他们的图形结果用本文的图形符号表示在图 13 中. 在上图中 $V = V_d + V_{nd}$, 而 $G = G_o + G_{nd}$. 从(16)式可以得到图 14(a)–(d)的等式. 另外我们定义一个新的图形 14(e)为

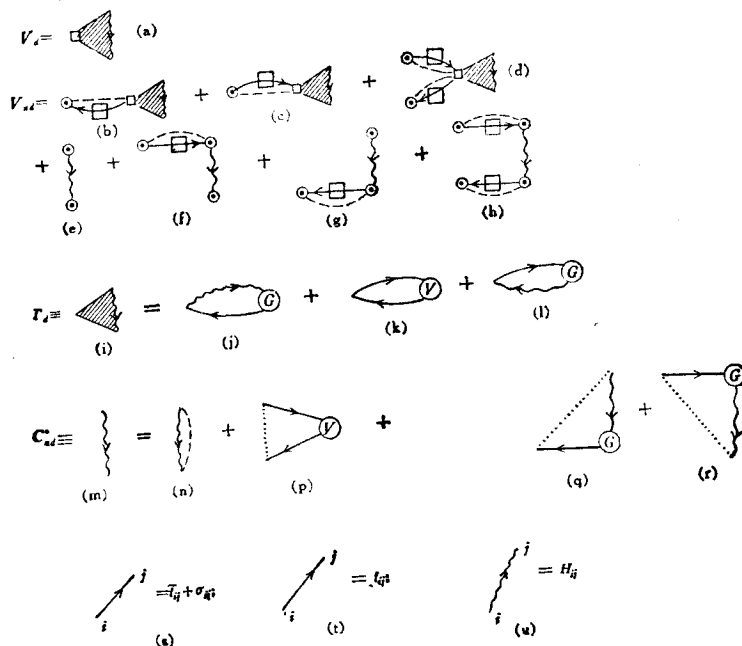


图 13

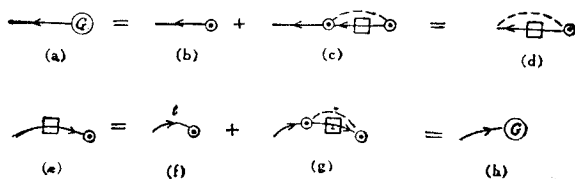


图 14

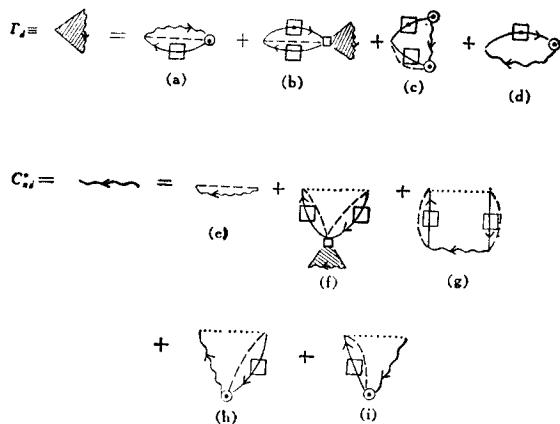


图 15

14(f) 和 14(g) 图的总和,也可表示为 14(h).将图 13(a)一(h)分别代入图 13(k) 及 13(p) 中,并利用图 14(a)一(h) 的关系,可将图 13 中的 Γ_d 及 C_{sd}^* 重新表示在图 15 中.

为了将图 15 与图 9 比较,必须找出图 14(e) 与 $(t + T)$ 之间的关系.先将代表 $(t + T)$ 的图 16(a) 分成图 16(b)一(c) 及图 16(f)一(h) 两部分.对第一部分中连接 o 点的虚

线如 $(o-i)$, $(o-j)$ 等, 按单格点图形的原则展开后, 再加上第二部分. 图 16(a) 用图 14(e) 可表示为图 16(j) 与 16(k) 两个图. 利用图 8 中图 4(m) 与图 8(a), (b) 自洽方程展开可得图 16(e)–(n). 现在将图 15 中 C_{nd}^* 图的自洽方程不断展开, 用一种简单的符号来表示展开的图形, 如图 16(p) 及 (q) 可以用 dg 及 $dhhe$ 的符号表示. dg 表示图 15(d) 中 C_{nd}^* 部分用图 15(g) 套入. 而 $dhhe$ 则表示图 15(d) 中 C_{nd}^* 部分用图 15(h) 套入后再将图 15(h) 中的 C_{nd}^* 部分用图 15(h) 再套入. 最后图中的 C_{nd}^* 部分用图 15(e) 套入. 所以我们写的 $dhhe$ 其中每一个字母代表用那个字母在图 15 中的图形套入一次, 这样正好是图 16(q). 按这个方法将图 15 中 Γ_d 的图形用 C_{nd}^* 的自洽方程无穷展开后, 可归类成图 16(s), (t), (u), (v) 四个图. 图 16(s) 就是图 15(a), 而图 16(t), (u), (v) 分别是由不同种类归纳而成. 如图 16(u) 是由图 16(w)–(y) 等无穷多图的总和. 图 16(w) 也就是图 15(b). 这里用到了图 16(i)–(n) 的等式关系. 图 16(t) 是等于下类图形的总和:

$$\text{图 16(t)} = [de + dhe + dhhe + dhhhe + \cdots] \text{图}. \quad (70)$$

而图 16(v) 则是由下类图形所构成:

$$\begin{aligned} \text{图 16(v)} = & [15(c) + di] + [dhi + dg] + [dhhi + dhg] \\ & + [dhhhi + dhhg] + \cdots \text{图}. \end{aligned} \quad (71)$$

最后我们在 $(V_{nd})_{mn}$ 的两端连上 H_{nm} 并对 n, m 的所有格点求和, 并令其值为 Y_o ,

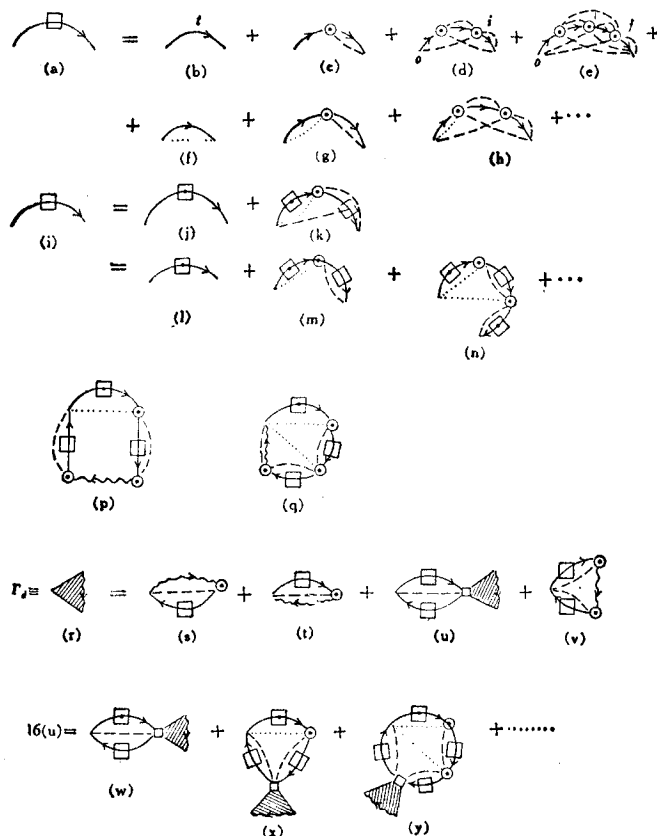


图 16

$$Y_o = \sum_{m,n} (V_{nd})_{mn} \cdot H_{nm}. \quad (72)$$

将图 15 中 C_{nd}^* 的自洽方程图 15(c)–(i) 代入图 13(c) 中, 则 Y_o 的值经过整理后可用图 17 表示.

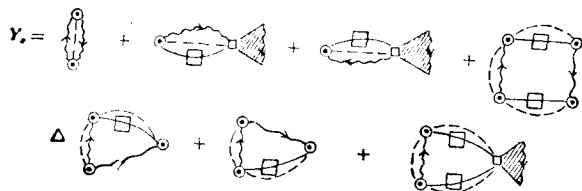


图 17

若将图 15 中 C_{nd}^* 与图 16 中 Γ_d 的耦合自洽方程图 15(c)–(i) 与图 16(r)–(v) 无穷展开后并代入图 17 Y_o 的图中, 可以得到所有图 9 中的图形. 所以我们得到的 CPA 方程结果是与 Itoh 等人用不同方法得到的结果是一致的. 本文提出的方法虽然比较复杂但是比较系统, 完全是由 CPA 所要求单格点图形的性质出发.

在结构无序的系统中单格点近似只适用于高浓度范围^[3]. 当浓度减小时电子的平均自由程变短, 单格点近似则渐渐不能适用. 当浓度再减小至金属-非金属转变区域时, 本文所描述的单格点近似则完全不能适用. 在高浓度范围内 CPA 方程又考虑了由于短程有序而造成电导率的顶角修正项, 这方面的实际数字计算据说 Ishida 正在进行^[6]. 若要将本文的 CPA 方程往更高阶推广, 则会引入更多更复杂的图形. 这方面的工作目前还没有, 这将是下一步有兴趣的问题.

作者感谢 Itoh 博士在文章发表前将预印本寄来.

参 考 文 献

- [1] L. M. Roth, *Phys. Rev. B*, **9**(1974), 2476.
L. M. Roth, *Phys. Rev. B*, **11**(1975), 3769.
- [2] M. Itoh and M. Watabe, *J. Phys. F*, **8**(1978), 1725.
- [3] Y. Ishida and F. Yonezawa, *Prog. Theor. Phys.*, **49**(1973), 731.
- [4] 张昭庆, 本刊本期.
- [5] F. Yonezawa and M. Watabe, *Phys. Rev. B*, **11**(1975), 4746.
- [6] M. Itoh, K. Niizeki and M. Watabe, 即将发表在 *J. Phys. F*.
- [7] L. M. Roth, and V. A. Singh *J. de Physique*, **C8**(1980), 459.
- [8] T. Matsubara and Y. Toyozawa, *Prog. Theor. Phys.* **26**(1961), 739.

ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF LIQUID METALS AND AMORPHOUS SOLIDS—COHERENT- POTENTIAL APPROXIMATION

ZHANG ZHAO-QING

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

A tight-binding model is used to obtain the electrical conductivity for liquid metals and amorphous solids within the framework of coherent-potential approximation. Following the method developed in our previous paper, the approximated equations for averaged two-particle Green's function of a lattice-gas model are obtained with short-range order for atoms included. The corresponding equations for liquid metals and amorphous solids are reduced by taking the limit of the lattice-gas model. Since the self-consistent equations so obtained contain all single-site diagrams, they have all the properties of the coherent-potential approximation.