

Zur Quantentheorie des elektrischen Restwiderstandes

II. Systeme hoher Störstellendichte mit spezieller Anwendung auf Cu_3Au

A. RAUH

Sektion Physik der Universität München, Lehrstuhl Prof. Dr. H. Bross

(Z. Naturforsch. **24 a**, 1859—1870 [1969]; eingegangen am 24. Juli 1969)

Herrn Professor Dr. F. BOPP zum 60. Geburtstag gewidmet

The influence of short-range order on the residual resistivity of Cu_3Au is investigated within a formalism previously reported. As compared to analogous methods based on the Boltzmann equation, the scattering of electrons by three correlated impurity centers is included. The characteristic numbers needed to describe the short-range order between the three centers can be determined within narrow limits by probability theory, using measured values for the Cowly-parameters. The change of resistivity due to the short-range order is found to be reasonably dealt with by including the two-center correlation only. However, as is further shown, this correlation cannot be taken into account correctly by the Boltzmann equation. For the electrical conductivity of alloys an expression is proposed which is to replace the familiar semiclassical result obtained from the Boltzmann equation.

Die Legierung Cu_3Au besitzt unterhalb einer kritischen Temperatur T_c (ca. 400 °C) eine Überstruktur als stabile Phase, wobei die Goldatome die Eckpunkte, die Kupferatome die flächenzentrierten Punkte einer kubischen Elementarzelle besetzen. Oberhalb T_c sind die beiden Atomsorten unregelmäßig auf die Gitterplätze verteilt. Die Überstruktur wird jedoch nicht vollständig zerstört, sondern es bleibt eine Nahordnung vorhanden, die sich über ca. 10 Gitterplätze erstreckt und bei weiter anwachsender Temperatur mehr und mehr verschwindet. Bei der Berechnung des Restwiderstandes wird im folgenden allein derjenige Streumechanismus berücksichtigt, der durch die, verglichen mit der Überstruktur, „falsche“ Besetzung der Gitterplätze verursacht wird. Experimentell läßt sich dieser Fall durch Abschrecken von $T > T_c$ auf tiefe Temperaturen und durch eine geeignete Vorbehandlung der Probe in guter Näherung realisieren¹.

Theoretisch wurde dieses Problem vor einiger Zeit von GIBSON² in der Näherung freier Elektronen mittels der Boltzmannschen Transportgleichung untersucht. Um die durch die Nahordnung verursachte Widerstandsänderung zu berechnen, hat GIBSON den üblichen³ kohärenten Streuterm, der die Interferenz zweier an verschiedenen Störstellen gestreuter Wellen darstellt, in die Übergangswahr-

scheinlichkeit mitaufgenommen. Dieses Vorgehen ist jedoch insofern problematisch, als nur die zwischen zwei Störstellen vorhandene Korrelation erfaßt wird und die für Nahordnungseffekte möglicherweise ebenso wichtigen Mehrfachstreuungen, an denen drei oder mehr miteinander korrelierte Störstellen beteiligt sind, vernachlässigt werden.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, den Einfluß der in der Boltzmann-Gleichung nicht erfaßten Streuprozesse auf den elektrischen Restwiderstand zu untersuchen. Dabei greifen wir auf den früher entwickelten Formalismus⁴ zurück, in den (im Gegensatz zur Boltzmann-Gleichung) keine, auf Phasenmittelungen hinauslaufende Annahmen über die Störstellenverteilung eingehen. Um den Rechenaufwand nicht ins Uferlose wachsen zu lassen, benützen wir das Modell freier Elektronen. Diese Näherung muß natürlich mit Vorbehalt betrachtet werden. Bei Li z. B. ist bekannt⁵, daß die Verwendung realistischer Wellenfunktionen zur Bestimmung des elektrischen Widerstandes zu einem Ergebnis führt, das sich um eine Größenordnung von dem mittels ebener Wellen erhaltenen unterscheidet. Es kommt uns jedoch in erster Linie auf die relative Größenordnung der von den verschiedenen Streuprozessen herrührenden Beiträge zur elektrischen Leitfähigkeit an. Wir glauben, daß diese Relativwerte, unabhän-

¹ A. C. DAMASK, Phys. Solids **1**, 23 [1956].

² J. B. GIBSON, Phys. Solids **1**, 27 [1956].

³ Wohl zuerst verwendet von L. NORDHEIM, Ann. Phys. Leipzig (5) **9**, 607, 641 [1931].

⁴ A. RAUH, Z. Naturforsch. **24 a**, 170 [1969], im folgenden als I zitiert.

⁵ H. BROSS u. A. HOLZ, Z. Naturforsch. **20 a**, 504 [1965].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

gig vom Modell, gültige Schlüsse auf den Einfluß der Phasenkorrelation bei Mehrfachstreuung zulassen.

Abschließend geben wir eine Inhaltsübersicht über die folgenden Kapitel. In Kapitel 1 wird die kristallographische Beschreibung der Nahordnung von Cu_3Au vorweggenommen. Es folgt in Kapitel 2 die Aufstellung der Grundgleichungen, der sich in Kapitel 3 eine genauere Festlegung des Potentials und der Propagatorfunktion anschließt. Die detaillierte Berechnung der in den Grundgleichungen gegebenen Ausdrücke erfolgt in Kapitel 4. In Kapitel 5 werden numerische Ergebnisse zusammengestellt und diskutiert.

1. Beschreibung der Nahordnung

Für die später durchzuführenden Rechnungen benötigen wir die Besetzungskonfiguration von zwei bzw. drei beliebig herausgegriffenen Gitterplätzen. Wegen der Nahordnung werden diese einmal bevorzugt durch Cu, das andere Mal bevorzugt durch Au-Atome besetzt sein, je nachdem in welchem Abstand die Gitterpunkte zueinander liegen.

Wir definieren die Größen

$$w(\frac{p_1 p_2}{A_1 A_2}) \quad \text{bzw.} \quad W(\frac{p_1 p_2 p_3}{A_1 A_2 A_3})$$

als Wahrscheinlichkeiten, an den Orten p_1 und p_2 die Atome A_1 und A_2 bzw. an den Orten p_1, p_2 und p_3 die Atome A_1, A_2 und A_3 anzutreffen. A_i ($i = 1, 2, 3$) kann ein A (Cu)- oder ein B (Au)-Atom sein.

Bei festgehaltener Ortskonfiguration (p_1, p_2) gibt es vier verschiedene Besetzungsmöglichkeiten durch A- und B-Atome, entsprechend vier Wahrscheinlichkeiten $w(\frac{p_1 p_2}{A_1 A_2})$ (s. erste Spalte von Tab. 1). Diese lassen sich durch die Konzentrationen der Legierungskomponenten m_A, m_B mit $m_A + m_B = 1$ und einen nur von den Orten p_1 und p_2 abhängigen Parameter ausdrücken. Es ist üblich, dazu die nach COWLEY⁶ benannten Parameter $\alpha_{1,2}$ zu verwenden, die man wie folgt definieren kann

$$\alpha_{1,2} = 1 - P_{A:B}^{1:2} - P_{B:A}^{1:2}, \quad (1)$$

wobei $P_{A:A_2}^{1:2}$ die bedingte Wahrscheinlichkeit dafür ist, am Ort 2 das Atom A_2 anzutreffen, wenn bekannt ist, daß am Ort 1 das Atom A vorliegt. Mit Hilfe der Symmetriebeziehung $w(\frac{p_1 p_2}{A_1 A_2}) = w(\frac{p_2 p_1}{A_2 A_1})$ und den Normierungsbedingungen für die beding-

ten Wahrscheinlichkeiten erhält man die in Tab. 1 angegebenen Ergebnisse. Falls $p_1 \neq p_2$ ist, so gilt bei fehlender Korrelation $P_{A:B}^{1:2} = m_B$ und $P_{B:A}^{1:2} = m_A$, also $\alpha_{1,2} = 0$.

Konfigur. $p_1 \quad p_2$		$w(\frac{p_1 p_2}{A_1 A_2})$	$w(\frac{p_1 p_2}{A_1 A_2})$
A	A	$m_A P_{A:A}^{1:2}$	$m_A(m_A + m_B \alpha_{1,2})$
A	B	$m_A P_{A:B}^{1:2} = m_B P_{B:A}^{2:1}$	$m_A m_B (1 - \alpha_{1,2})$
B	A	$m_B P_{B:A}^{1:2} = m_A P_{A:B}^{2:1}$	$m_A m_B (1 - \alpha_{1,2})$
B	B	$m_B P_{B:B}^{1:2}$	$m_B(m_B + m_A \alpha_{1,2})$

Tab. 1. Wahrscheinlichkeiten für die Besetzungskonfigurationen von zwei Gitterpunkten und ihr Zusammenhang mit den bedingten Wahrscheinlichkeiten $P_{A_1 A_2}^{1:2}$ bzw. den Nahordnungsparametern $\alpha_{1,2}$.

Zu $W(\frac{p_1 p_2 p_3}{A_1 A_2 A_3})$ gibt es bei festgehaltener Ortskonfiguration acht verschiedene Besetzungsmöglichkeiten (s. zweite Spalte von Tab. 2), deren zugehörige Wahrscheinlichkeiten mit W_1, W_2 bis W_8 durchnumeriert werden. Für die W_i gelten die in der dritten Spalte von Tab. 2 angegebenen Beziehungen, die es gestatten, alle W_i mit $i \neq 1$ rekursiv aus W_1 und den Wahrscheinlichkeiten $w(\frac{p_1 p_2}{A_1 A_2})$ bzw. (s. dritte Spalte von Tab. 1) den Konzentrationen m_A, m_B und den Cowley-Parametern $\alpha_{1,2}$ zu berechnen. Außerdem führen die Beziehungen der Tab. 2 zusammen mit der Forderung, daß alle W_i positiv definit sein müssen, zu einschränkenden Bedingungen an den Wertebereich von W_1 und damit aller W_i (vgl. Tab. 3).

i	Konfigur. $p_1 \quad p_2 \quad p_3$			$W_i(p_1, p_2, p_3)$	$W_i^{\text{unkorr.}}$
	p_1	p_2	p_3		
1	A	A	A	W_1	m_A^3
2	A	A	B	$W_2 + W_1 = w(\frac{p_1 p_2}{A A})$	$m_A^2 m_B$
3	A	B	A	$W_3 + W_1 = w(\frac{p_1 p_3}{A A})$	$m_A^2 m_B$
4	A	B	B	$W_4 + W_2 = w(\frac{p_1 p_3}{A B})$	$m_A m_B^2$
5	B	A	A	$W_5 + W_1 = w(\frac{p_2 p_3}{A A})$	$m_A^2 m_B$
6	B	A	B	$W_6 + W_2 = w(\frac{p_2 p_3}{A B})$	$m_A m_B^2$
7	B	B	A	$W_7 + W_3 = w(\frac{p_2 p_3}{B A})$	$m_A m_B^2$
8	B	B	B	$W_8 + W_4 = w(\frac{p_2 p_3}{B B})$	m_B^3

Tab. 2. Beziehungen zwischen den Wahrscheinlichkeiten W_i und den bekannten Parametern w . Bei fehlender Nahordnung lassen sich die Größen W_i entsprechend der 4. Spalte durch die Konzentration m_A und m_B ausdrücken.

⁶ J. M. COWLEY, J. Appl. Phys. **21**, 24 [1950] u. Phys. Rev. **77**, 669 [1950].

$\sqrt{2}/a \mid R_2$	$\sqrt{2}/a \mid R_3$	$\sqrt{2}/a \mid R_2 - R_3$	Bereich für $\bar{W}_1 = 16 W_1$	Intervallmitte \bar{W}_1	Bereich für $\bar{W}_8 = 16 W_8$
1	1	1	$5,088 \leq \bar{W}_1 \leq 5,632$	5,360	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 0,544$
1	1	$\sqrt{2}$	$6,102 \leq \bar{W}_1 \leq 6,646$	6,374	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 0,544$
1	1	$\sqrt{3}$	$5,571 \leq \bar{W}_1 \leq 6,115$	5,843	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 0,544$
1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$6,585 \leq \bar{W}_1 \leq 7,129$	6,857	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 0,544$
1	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$6,054 \leq \bar{W}_1 \leq 6,598$	6,326	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 0,544$
$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$6,585 \leq \bar{W}_1 \leq 7,612$	7,0985	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 1,027$
$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$6,054 \leq \bar{W}_1 \leq 7,801$	6,5675	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 1,027$
1	1	$\sqrt{4}$	$5,829 \leq \bar{W}_1 \leq 6,373$	6,101	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 0,544$
1	$\sqrt{3}$	$\sqrt{4}$	$6,312 \leq \bar{W}_1 \leq 6,856$	6,584	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 0,544$
$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{4}$	$7,116 \leq \bar{W}_1 \leq 8,401$	7,7585	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 1,285$
$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{4}$	$6,312 \leq \bar{W}_1 \leq 7,339$	6,8255	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 1,027$
$\sqrt{4}$	$\sqrt{4}$	$\sqrt{4}$	$6,570 \leq \bar{W}_1 \leq 7,855$	7,2125	$0 \leq \bar{W}_8 \leq 1,285$

Tab. 3. Zulässiger Wertebereich von $\bar{W}_1 = W(\frac{1}{A} \frac{2}{A} \frac{3}{A})$ und von $\bar{W}_8 = W(\frac{1}{B} \frac{2}{B} \frac{3}{B})$ für die Legierung Cu₃Au bei $T=405^\circ\text{C}$. Die Intervallgrenzen sind durch die Wahrscheinlichkeiten w eindeutig festgelegt. w wurde aus Meßwerten⁶ für $\alpha_{i,k}$ gemäß den in Tab. 1 angegebenen Beziehungen berechnet. Der Koordinatenursprung ist in den Gitterpunkt p_1 gelegt. a ist die Gitterkonstante.

Mit $\bar{W}_1(p_1, p_2, p_3)$ kommen neue Parameter in die Theorie, über die bisher keine experimentellen Daten vorliegen. Eine theoretische Berechnung ist allein schon deshalb schwierig, weil die Wechselwirkungen zwischen den Gitterplätzen nicht bekannt sind. Insbesondere steht nicht von vornherein fest, ob neben den Zwei-Gitterpunktwechselwirkungen auch solche zwischen drei und mehr Gitterpunkten berücksichtigt werden müssen. Für den Spezialfall einer binären 50%-Legierung und unter der Annahme, daß nur Wechselwirkungen zwischen einer geraden Anzahl von Gitterplätzen auftreten, hat CLAPP⁷ gezeigt, daß die Wahrscheinlichkeiten \bar{W}_i exakt durch die Cowley-Parameter ausgedrückt werden können. Um im vorliegenden Fall den Einfluß der Dreigitterpunktskorrelation auf den Restwiderstand abzuschätzen, werden wir \bar{W}_1 für jede Abstandskonfiguration jeweils durch den Mittelwert des zulässigen Intervalls festlegen (vgl. 5. Spalte von Tab. 3).

Im folgenden wird der Leitfähigkeitstensor durch Funktionen $f(p_1, p_2)$ und $F(p_1, p_2, p_3)$ ausgedrückt werden, die außer vom Ortsvektor \mathbf{R}_{p_i} auch noch von der Atomart, mit der die Gitterplätze besetzt sind, abhängen. Wir werden diese Funktionen durch folgende Erwartungswerte ersetzen

$$\begin{aligned} \langle f(p_1, p_2) \rangle &= \sum_{A_1, A_2} w(\frac{p_1}{A_1} \frac{p_2}{A_2}) f(A_1, A_2), \\ \langle F(p_1, p_2, p_3) \rangle &= \sum_{A_1, A_2, A_3} W(\frac{p_1}{A_1} \frac{p_2}{A_2} \frac{p_3}{A_3}) F(A_1, A_2, A_3). \end{aligned} \quad (2)$$

Um den durch die Nahordnung verursachten Effekt untersuchen zu können, spalten wir die oben definierten Erwartungswerte in einen unkorrelierten und einen korrelierten Summanden auf, wobei der unkorrelierte Summand durch den Erwartungswert bei fehlender Nahordnung ($\alpha_{i,k} = 0$ für $i \neq k$) gegeben ist. Mit Hilfe der dritten Spalte von Tab. 1 und der letzten Spalte von Tab. 2 ergibt sich

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad \langle f(p_1, p_2) \rangle^{\text{unkorr.}} &= m_A^2 f(A, A) + m_A m_B (f(A, B) + f(B, A)) + m_B^2 f(B, B); \\ \text{b)} \quad \langle f(p_1, p_2) \rangle^{\text{kor.}} &= m_A m_B \alpha_{p_1 p_2} (f(A, A) - f(A, B) - f(B, A) + f(B, B)); \\ \text{c)} \quad \langle F(p_1, p_2, p_3) \rangle^{\text{unkorr.}} &= m_A^3 F(A, A, A) + m_A m_B [m_A F(A, A, B) + m_A F(A, B, A) + m_A F(B, A, A) \\ &\quad + m_B F(A, B, B) + m_B F(B, A, B) + m_B F(B, B, A)] + m_B^3 F(B, B, B); \\ \text{d)} \quad \langle F(p_1, p_2, p_3) \rangle^{\text{kor.}} &= \langle F(p_1, p_2, p_3) \rangle - \langle F(p_1, p_2, p_3) \rangle^{\text{unkorr.}}. \end{aligned} \quad (3)$$

⁷ PH. CLAPP, Phys. Rev. **164**, 1018 [1967].

2. Ausgangsgleichungen zur Berechnung des elektrischen Widerstandes

In der Eielektronennäherung lautet der Hamilton-Operator für eine binäre Legierung

$$\mathcal{H} = \frac{p_{\text{op}}^2}{2m} + \sum_{p_A} V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{p_A}) + \sum_{p_B} V_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{p_B}). \quad (4)$$

Dabei bedeutet p_{op} den Impulsoperator; V_A und V_B bzw. \mathbf{R}_{p_A} und \mathbf{R}_{p_B} die Potentiale bzw. Gitterpunktvektoren eines A- und B-Atoms. Vom Potential läßt sich ein gitterperiodischer Anteil abspalten. Es ergibt sich⁸

$$\mathcal{H} = \underbrace{p_{\text{op}}^2/2m + W(\mathbf{r})}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{U(\mathbf{r})}_{\mathcal{H}_1} \quad (5)$$

mit

$$W(\mathbf{r}) = \sum_p \langle m_A V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) + m_B V_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) \rangle$$

Zur Bestimmung des Leitfähigkeitstensors σ_{ij} greifen wir auf I zurück. Aus den Gleichungen – (37), (39) und (20) – entnehmen wir

$$\sigma_{ij} = - \int_0^\infty \frac{\partial f}{\partial E} \sigma_{ij}(E) dE, \quad \sigma_{ij}(E) = - \frac{\hbar^3}{\pi} \frac{e^2}{m^2} (\text{Re } K_{ij}^{++} - K_{ij}^{+-}) \quad (7)$$

mit

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad K_{ij}^{++} \text{ diag} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} D_{\mathbf{k}}^2(E) k_i k_j, \\ \text{b)} \quad K_{ij}^{++} \text{ ndiag} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} D_{\mathbf{k}}^2 D_{\mathbf{k}'}^2 k_i k_j' \frac{1}{V^2} \left\langle \sum_{p_2, p_3} \tilde{t}_{p_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) \tilde{t}_{p_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) \right. \\ &\quad + 2 \sum_{\substack{p_1 \\ p_2 \neq p_3}} \tilde{t}_{p_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) \sum_{\mathbf{k}_1} [\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}'] \frac{1}{V} \tilde{t}_{p_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; E) D_{\mathbf{k}_1}(E) \tilde{t}_{p_3}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'; E) \\ &\quad \left. + \text{Terme höherer Ordnung bez. } \tilde{t} \right\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad K_{ij}^{+-} \text{ diag} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} |D_{\mathbf{k}}(E)|^2 k_i k_j \\ \text{b)} \quad K_{ij}^{+-} \text{ ndiag} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 k_i k_j' \frac{1}{V^2} \left\langle \sum_{p, p'} \tilde{t}_p(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tilde{t}_{p'}^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right. \\ &\quad + \left[\sum_{p, p' \neq p''} \tilde{t}_p^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}_1} [\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}'] \frac{1}{V} \tilde{t}_{p'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) D_{\mathbf{k}_1} \tilde{t}_{p''}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') + \text{konj. kompl.} \right] \\ &\quad \left. + \text{Terme höherer Ordnung bez. } \tilde{t} \right\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Dabei ist $D_{\mathbf{k}}(E)$ ein Diagonalmatrixelement (Quasiteilchenpropagator) der Resolvente $(E + i \cdot 0 - \mathcal{H})^{-1}$. Es beschreibt die Bewegung eines, durch den Quasimpuls $\hbar \mathbf{k}$ charakterisierten Elektrons zwischen

und

$$U(\mathbf{r}) = \sum_p C_p \langle V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) - V_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) \rangle,$$

wobei C_p gegeben ist durch

$$C_p = \begin{cases} m_B & \text{falls am Ort } \mathbf{R}_p \text{ ein A-Atom,} \\ -m_A & \text{falls am Ort } \mathbf{R}_p \text{ ein B-Atom.} \end{cases} \quad (6)$$

Im hier angegebenen Potential wurde vernachlässigt, daß die Ortsvektoren \mathbf{R}_p , infolge der verschiedenen Ionenradien von Cu und Au, von den Punktlagen des idealen Gitters geringfügig abweichen. Ebenfalls blieb eine schwache, zusätzliche Ortsabhängigkeit der Funktionen $V_A(\mathbf{r})$ bzw. $V_B(\mathbf{r})$, die den Einfluß der jeweils verschiedenen Umgebung eines Atoms widerspiegelt, unberücksichtigt. Die einzelnen Ionen denken wir uns – wie beim Wigner-Seitz-Modell – außerhalb des Atompolyeders vollständig abgeschirmt. Schließlich werden wir als Eigenfunktionen von \mathcal{H}_0 näherungsweise ebene Wellen verwenden (vgl. Einleitung).

zwei Streuungen. \tilde{t}_p ist die renormierte Streumatrix zum Potential

$$U_p(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) = C_p (V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) - V_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p)).$$

⁸ Siehe z. B. E. VERBOVEN, Physica **26**, 1011 [1960].

Die in (9b) stehenden Ausdrücke beschreiben Streuprozesse eines Quasiteilchens, da jeweils das Produkt einer Streuamplitude mit einer konjugiert komplexen Streuamplitude auftritt. Der erste Term stellt im Wesentlichen die Interferenz zweier, an den Störstellen p bzw. p' einfach gestreuter Wellen dar, während der zweite Term die Interferenz einer einfach gestreuten mit einer zweifach gestreuten Welle beinhaltet. Dagegen berücksichtigen die Terme von (8b) den Einfluß der durch die Stöße verursachten Energieunschärfe. Es läßt sich leicht abschätzen, daß dieser Effekt im Vergleich zu dem Beitrag (9b) vernachlässigt werden kann. Man beachte dazu, daß die „ k -Summe“ in (9b) bzw. (8b) nach Durchführung der Winkelintegration die Struktur

$$J_1 = \int_0^\infty dk |D_k|^2 f(k) \quad \text{bzw.} \quad J_2 = \int_0^\infty dk D_k^2 f(k)$$

besitzt. Eine genauere Analyse⁹ zeigt, daß der Quotient J_2/J_1 von der Größenordnung κ/k_E ist, wobei k_E der Wellenvektor zur Energie E und κ der Imaginärteil der Polstelle k_P von $D_k(E)$ ist. Im numerischen Teil wird sich $\kappa/k_E \approx 3 \cdot 10^{-3}$ ergeben.

Obwohl der Ausdruck (8a) von entsprechender Struktur wie der Term (8b) ist, darf er nicht vernachlässigt werden, weil er mit wachsendem k divergiert (D_k ist für große k proportional $1/k^2$). Die für den Leitfähigkeitstensor benötigte Kombination (7), $[\text{Re } K_{ij}^{+-} - K_{ij}^{--}]$ bleibt jedoch endlich.

Die Terme (9b) werden jetzt noch etwas umgeformt. Zunächst separieren wir in der Streumatrix \tilde{t}_p die explizite Ortsabhängigkeit gemäß

$$t_p(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_p\} \tau_p(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (10)$$

ab. τ_p beschreibt die Streuung am Potential

$$U_p(\mathbf{r}) = C_p [V_A(\mathbf{r}) - V_B(\mathbf{r})].$$

Ferner werden die Produkte der τ_p -Funktionen, die von den Zufallsvariablen C_p [vgl. (6)] abhängen, durch die Mittelwerte gemäß (2) bzw. (3) ersetzt. Dies wird durch spitze Klammern gekennzeichnet. Berücksichtigt man die Invarianz der Wahrscheinlichkeiten w und W gegenüber kubischen Transformationen und legt den Koordinatenursprung jeweils in den Gitterpunkt p_1 , so erhält man

$$K_{ij}^{+-} - \text{ndiag} = \frac{N}{V} \frac{\delta_{ij}}{3} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{V^2}$$

⁹ A. RAUH, Dissertation, Universität München 1968, Anhang III (künftig mit D zitiert).

$$\begin{aligned} & \langle \sum_{p_2} \tau_{p_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau_{p_2}^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \rangle \cdot \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_{p_2}\} \\ & + \left[\sum_{p_2 \neq p_1} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} \langle \tau_{p_1}^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \tau_{p_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \tau_{p_3}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') \rangle \right. \\ & \quad \cdot \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{R}_{p_2}\} \cdot \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_{p_3}\} \\ & \quad \left. + \text{konj. kompl.} \right] + \text{höhere Terme} \rangle. \quad (11) \end{aligned}$$

Dabei sind die in (9b) geforderten Summationsbeschränkungen durch einen Strich am Summationszeichen angedeutet. Da die Reihendarstellung (10) konvergiert und da wir uns des Aufwandes wegen auf solche Streuprozesse beschränken wollen, an denen bis zu drei Störstellen beteiligt sind, werden wir nur die in (10) explizit angegebenen Terme untersuchen. Dabei ist es zweckmäßig, gewisse Falluntersuchungen bezüglich der gegenseitigen Lage der Störstellen einzuführen. Zur besseren Übersicht stellen wir die verschiedenen Möglichkeiten graphisch dar. Die beiden interferierenden Streuwellen bilden wir durch zwei untereinander gezeichnete Linien ab, den Ort einer Störstelle durch einen auf der betreffenden Linie markierten Punkt. Ferner werden identische Störstellen durch eine gestrichelte Linie, zwei korrelierte Störstellen p_1 und p_2 , die notwendig im Nahordnungsbereich $|\mathbf{R}_{p_1} - \mathbf{R}_{p_2}| < s$ liegen müssen, durch eine Schlangenlinie gekennzeichnet. Es ergeben sich die in Abb. 1 dargestellten Konstellationen für die in (11) enthaltenen Streuprozesse. In Abb. 1 A

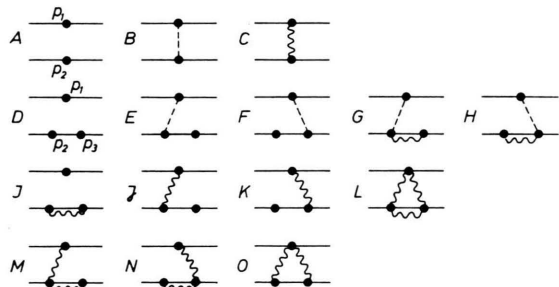


Abb. 1. Interferenzterme, die die Streuung eines Elektrons an zwei bzw. drei Störstellen beschreiben. Die Prozesse D bis O werden von der Boltzmann-Gleichung nicht erfaßt.

ist ein Interferenzterm mit zwei verschiedenen, unkorrelierten ($|\mathbf{R}_{p_1} - \mathbf{R}_{p_2}| > s$) Störstellen dargestellt. Abbildung 1 B zeigt eine inkohärente Streuung, da die Störstellen der miteinander interferierenden Wellen identisch sind. In Abb. 1 C interferieren zwei Streuwellen miteinander, die von verschiedenen, korrelierten Störstellen herrühren. Die Streuprozesse 1 A bis 1 O entsprechen, formal gesehen, einer Klasseneinteilung der Störstellenmengen $\{p_i, p_k\}$ bzw.

$\{p_i, p_k, p_l\}$, wobei i, k, l von 1 bis N läuft. Beispielsweise ist im Ausdruck der zum Streuprozess 1M gehört, über die Untermenge

$$\sum_{p_1, p_2, p_3} \{ |\mathbf{R}_{p_1} - \mathbf{R}_{p_2}| \leq s; |\mathbf{R}_{p_2} - \mathbf{R}_{p_3}| \leq s; |\mathbf{R}_{p_1} - \mathbf{R}_{p_3}| > s \}$$

zu summieren. Im folgenden werden wir aus den Streutermen IA bis IO die für unsere Untersuchungen wesentlichen Beiträge auswählen. Zunächst vernachlässigen wir die zu 1M bis 1O gehörenden Prozesse, da die entsprechenden Störstellenmengen klein sind im Vergleich zu den bei 1L auftretenden Termen. Ferner setzen wir voraus, daß die Streumatrix $\tau(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ nur von den Beträgen der Vektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}' abhängt. Physikalisch ist diese Annahme neben-sächlich, da die zur Beschreibung der Phasenkorrelation wesentliche Winkelabhängigkeit durch die Transformation (10) bereits abgespalten wurde. In den Ausdrücken mit identischen Störstellen sind die Winkelintegrationen bez. \mathbf{k} und \mathbf{k}' vom Typus

$$\int d\Omega_{\mathbf{k}} d\Omega_{\mathbf{k}'} \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \exp\{i \mathbf{k}' \mathbf{R}_p\} = 0.$$

Die Beiträge von 1B und von 1E bis 1H verschwinden also identisch. Der Ausdruck zum Streuprozess 1J läßt sich durch Vertauschen $\mathbf{k} \longleftrightarrow \mathbf{k}'$ und

$\mathbf{R}_{p_3} \longleftrightarrow -\mathbf{R}_{p_3}$ in den Abb. 1I entsprechenden Term überführen. Wenn man zunächst nur den von den Störstellen abhängenden Faktor betrachtet, erhält man

$$2 \sum_{p_2 \neq p_3} \{ |\mathbf{R}_{p_1} - \mathbf{R}_{p_3}| > s; |\mathbf{R}_{p_3}| > s \} \langle \tau_{p_3} \rangle \langle \tau_{p_1}^* \tau_{p_2} \rangle^{\text{kor.}} \cdot \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \mathbf{R}_{p_2}\} \cdot \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_3}\}. \quad (12)$$

Der Mittelwert von τ_{p_3} hängt nicht mehr vom Ortsvektor \mathbf{R}_{p_3} ab, da $\langle \tau_p \rangle = m_A \tau_A + m_B \tau_B$ gilt. Mit der Variablensubstitution $\mathbf{R}_{p_3} = \mathbf{R}_{p_2} + \mathbf{R}_{p_4}$ erhält man deshalb, wenn man anschließend zur alten Bezeichnungsweise zurückkehrt

$$2 \langle \tau_p \rangle \sum_{|\mathbf{R}_{p_3}| > s} \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_3}\} \cdot \sum_{p_2 (\neq p_1)} \langle \tau_{p_1}^* \tau_{p_2} \rangle^{\text{kor.}} \cdot \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_2}\}. \quad (13)$$

Dabei haben wir die Bedingung (in den neuen Variablen $|\mathbf{R}_{p_2} + \mathbf{R}_{p_3}| > s$ vernachlässigt, da hierdurch nur relativ wenige Summanden berührt werden. Nach einer entsprechenden Substitution erhält man für den störstellenabhängigen Anteil von 1K

$$\langle \tau_p^* \rangle \sum_{|\mathbf{R}_{p_3}| > s} \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_3}\} \sum_{p_2 (\neq 0)} \langle \tau_{p=0} \tau_{p_2} \rangle^{\text{kor.}} \cdot \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_2}\}. \quad (14)$$

Zusammengefaßt lauten die weiter zu untersuchenden Terme aus (9b), wenn der vom Streuprozess 1X ($X = A, B, \dots, O$) herrührende Beitrag zum Tensor $K_{ij}^{\pm} - \text{ndiag}$ mit $K_{ij}^{(1X)}$ bezeichnet wird

$$\begin{aligned} K_{ij}^{(1A)} &= \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \langle \tau_{p_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau_{p_2}^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \rangle^{\text{unkorr.}} \sum_{p_2} \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_2}\}; \\ K_{ij}^{(1C)} &= \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \sum_{p_2 (\neq p_1)} \langle \tau_{p_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau_{p_2}^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \rangle^{\text{kor.}} \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_2}\}; \\ K_{ij}^{(1D)} &= \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} D_{\mathbf{k}_1} \langle \tau_{p_1}^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau_{p_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \tau_{p_3}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \rangle^{\text{unkorr.}} \\ &\quad \cdot \sum_{p_2 \neq p_3} \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \mathbf{R}_{p_2}\} \cdot \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_3}\} + \text{konj. kompl.}; \\ K_{ij}^{(1I+1J)} &= \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} D_{\mathbf{k}_1} 2 \langle \tau_p(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \rangle \\ &\quad \cdot \sum_{|\mathbf{R}_{p_3}| > s} \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_3}\} \sum_{p_2 \neq 0} \langle \tau_{p=0}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau_{p_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \rangle^{\text{kor.}} \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_2}\} + \text{konj. kompl.}; \\ K_{ij}^{(1K)} &= \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} D_{\mathbf{k}_1} \langle \tau_p^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rangle \\ &\quad \cdot \sum_{|\mathbf{R}_{p_3}| > s} \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_3}\} \sum_{p_2 (\neq 0)} \langle \tau_{p=0}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \tau_{p_2}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') \rangle^{\text{kor.}} \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_2}\} + \text{konj. kompl.}; \\ K_{ij}^{(1L)} &= \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} D_{\mathbf{k}_1} \\ &\quad \cdot \sum_{p_2 \neq p_3} \langle \tau_{p_1}^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau_{p_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \tau_{p_3}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') \rangle^{\text{kor.}} \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \mathbf{R}_{p_2}\} \cdot \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \mathbf{R}_{p_3}\} + \text{konj. kompl.} \end{aligned} \quad (15)$$

Wir vergleichen nun die in (15) angegebenen Beiträge zum Leitfähigkeitstensor mit den in der Boltzmann-Gleichung erfaßten Streuprozessen. Es kommt uns dabei lediglich auf die Struktur der einzelnen Ausdrücke, nicht auf die Art der Näherung an, in welcher der Quasiteilchenpropagator $D_{\mathbf{k}}(E)$ oder die Streumatrix $t_p(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ berechnet sind.

In der Boltzmann-Gleichung ist die Information über die Streuung der Elektronen nur in der Übergangswahrscheinlichkeit $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ enthalten. (Die ähnliche Bezeichnung für die Wahrscheinlichkeiten W_i aus Kapitel 2 bzw. für die Übergangswahrscheinlichkeit $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ dürfte keine Verwirrung stiften.) Zur Berechnung des Restwiderstandes von Legierungen wurde $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ von GIBSON² und anderen (vgl. Einleitung)

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \sim \sum_{p, p'} \langle t_p^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') t_{p'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rangle$$

angesetzt, wobei die spitzen Klammern die Mittelung über die Legierungskonfiguration gemäß Formel (2) bedeuten. In diesem Ansatz sind neben dem inkohärenten Streuterm 1B ($\mathbf{R}_p = \mathbf{R}_{p'}$) auch die beiden kohärenten Prozesse 1A ($|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}| > s$) und 1C ($0 \neq |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}| < s$) berücksichtigt. Die Verteilungsfunktion $\Phi_j(\mathbf{k})$, die aus der Boltzmann-Gleichung zu berechnen ist, enthält jedoch nicht nur die in $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ erfaßten Strukturen, sondern, da sie Lösung einer Integralgleichung darstellt, alle höheren Streuprozesse, die sich aus den Basistermen 1A bis 1C durch „Hintereinanderschalten“ ergeben. Um dies mathematisch zu zeigen, verwenden wir Ergebnisse aus Teil I, Kap. 4. Dort wurde die Relation [vgl. (I,54) und (I,45)]

$$\Phi_j(\mathbf{k}) = \text{const} \left\langle k_j + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}'}(E)|^2 k_j' S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right\rangle \quad (16)$$

angegeben, wobei die Funktion $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ durch die Integralgleichung

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \tilde{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V^2} \tilde{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) |D_{\mathbf{k}_1}(E)|^2 S(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \quad (17)$$

definiert war, mit \tilde{W} proportional $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Die in $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ und somit in $\Phi_j(\mathbf{k})$ berücksichtigten Streuprozesse erhält man durch iterative Lösung der Integralgleichung (17). In nullter Näherung ergibt sich

$$S_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \tilde{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \sim \sum_{p, p'} \langle t_p^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') t_{p'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rangle,$$

d. h. die Basisprozesse. Beim nächsten Iterationsschritt kommt ein Ausdruck proportional

$$\sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}_1}|^2 \left\langle \sum_{p, p'} t_p^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) t_{p'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \right\rangle \cdot \left\langle \sum_{p, p'} t_p^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') t_{p'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') \right\rangle$$

hinzu, der sich aus den in Abb. 2 skizzierten Streuprozessen zusammensetzt. Die weiteren Terme beschreiben Streuung an 6, 8 usw. Störstellen. Man

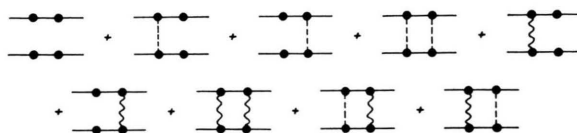


Abb. 2. In der Boltzmann-Gleichung enthaltene Streuprozesse, an denen vier Störstellen beteiligt sind.

stellt fest, daß die Interferenzterme mit drei Störstellen (vgl. Abb. 1D bis 1O) in der Boltzmann-Gleichung nicht erfaßt sind. Ferner fehlen zu den Streuprozessen der Abb. 2 Interferenzterme derselben Ordnung, jedoch mit drei bzw. vier miteinander korrelierten Störstellen, z. B. die in Abb. 3 dargestellten Prozesse.

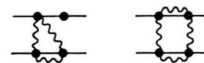


Abb. 3. Streuprozesse mit drei bzw. vier miteinander korrelierten Störstellen.

Auf Grund der obigen Analyse erheben sich zwei Fragen, die möglichst durch explizite Berechnung der Ausdrücke (15) beantwortet werden sollen. Zunächst interessiert, ob die Streuprozesse 1D bis 1O einen, im Vergleich zu den in der Boltzmann-Gleichung enthaltenen Termen 1A bis 1C, wesentlichen Beitrag zum Nahordnungseffekt des Restwiderstandes liefern. Ferner möchte man gerne wissen, ob die Vernachlässigung der zwischen mehr als zwei Störstellen auftretenden Korrelation schwerwiegend ist. Durch Vergleich des Beitrags von 1L mit den Beiträgen 1I, 1J und 1K hoffen wir, die zweite Frage zu beantworten.

3. Streupotential und Propagator

Zur Berechnung der Ausdrücke (15) (ausgenommen $K_{ij}^{(1A+1C)}$) muß die Streumatrix $\tau_p(k, k')$ auch außerhalb der Energieschale bekannt sein. Um die Integrationen elementar durchführen zu können, verschaffen wir uns auf folgende Weise ein separab-

des Potential. Wir gehen aus von dem Kastenpotential

$$U(\mathbf{r}) = V_A(\mathbf{r}) - V_B(\mathbf{r}) = \begin{cases} v_0 = \text{const} & \text{für } r \leq r_s, \\ 0 & \text{für } r > r_s. \end{cases} \quad (18)$$

Für ein Matricelement erhält man dann

$$\langle \mathbf{k} | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle = 4\pi \sqrt{\pi/2} v_0 r_s^3 \frac{I_{\frac{3}{2}}(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| r_s)}{(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| r_s)^{3/2}}, \quad (19)$$

wobei $I_{\frac{3}{2}}$ eine Bessel-Funktion ist. Wenn φ den Winkel zwischen \mathbf{k} und \mathbf{k}' bezeichnet, so kann die Funktion $I_{\frac{3}{2}}(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| r_s) / (|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| r_s)^{3/2}$ nach Gegenbauer-Polynomen $C_\nu^{\frac{3}{2}}(\cos \varphi)$, $\nu = 0, 1, 2, \dots$ entwickelt werden¹⁰. Bricht man nach den Polynomen nullter Ordnung ab, so erhält man folgenden separablen Ausdruck, den wir in Zukunft verwenden wollen

$$\langle \mathbf{k} | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle = 6\pi^2 r_s^3 v_0 \frac{I_{\frac{3}{2}}(k r_s)}{(k r_s)^{3/2}} \frac{I_{\frac{3}{2}}(k' r_s)}{(k' r_s)^{3/2}}. \quad (20)$$

Aus der Integralgleichung

$$\tau_p(k, k') = C_p \langle \mathbf{k} | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle + \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} C_p \langle \mathbf{k} | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}_1 \rangle D_{\mathbf{k}_1} \tau_p(k_1, k') \quad (21)$$

kann jetzt die Streumatrix $\tau_p(k, k')$ sofort berechnet werden zu

$$\tau_p(k, k') = \frac{C_p \langle \mathbf{k} | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle}{1 - C_p \sum_{\mathbf{k}_1} (1/V) D_{\mathbf{k}_1} \langle \mathbf{k}_1 | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}_1 \rangle}. \quad (22)$$

Im Propagator $D_{\mathbf{k}}(E) = (E - \varepsilon_{\mathbf{k}} - G_{\mathbf{k}}(E))^{-1}$ kann die Energieverschiebung $G_{\mathbf{k}}(E)$ durch

$$G_{\mathbf{k}}^{(1)}(E) = \frac{1}{V} \sum_p \tilde{t}_p(\mathbf{k}, \mathbf{k}; E) \quad (23)$$

ersetzt werden, da die vernachlässigten Terme für $E = \zeta$ von der Größenordnung $\Delta\zeta/\zeta$ sind⁴. In dieser Näherung hängt $D_{\mathbf{k}}(E)$ nur noch vom Betrag k des Vektors \mathbf{k} ab. Als Funktion der komplexen Variablen k ist $D_{\mathbf{k}}(E)$ analytisch und verschwindet für sehr große k mindestens von der Ordnung $1/k^2$. Bei komplexer Integration bezüglich k werden wir aus physikalischen Gründen nur die beiden in der Nähe der Fermi-Kante ($E = \zeta$) liegenden Pole berücksichtigen: diese erhält man durch Auflösen der transzendenten Gleichung

$$E - \varepsilon_{\mathbf{k}_E + \Delta\mathbf{k}_E} - G_{\mathbf{k}_E + \Delta\mathbf{k}_E}^{(1)} = 0. \quad (24)$$

¹⁰ I. S. GRADSHTEYN u. I. M. RYZHIK, Table of Integrals Series and Products, Academic Press, New York 1965.

Es ergibt sich in der Näherung $\Delta k_E/k_E \ll 1$

$$\Delta k_E = - (m/\hbar^2 k_E) G_{\mathbf{k}_E}^{(1)}(E) = -6\pi^2 v_0 r_s^3 \frac{m}{\hbar^2 k_E} \frac{I_{\frac{3}{2}}^2(k_E r_s)}{(k_E r_s)^3} \frac{1}{V} \sum_p \frac{C_p}{1 - C_p L} \quad (25)$$

$$\text{mit } L = \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} D_{\mathbf{k}_1} \langle \mathbf{k}_1 | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}_1 \rangle.$$

4. Weitere Umformung der Ausgangsgleichungen

Der Leitfähigkeitstensor kann wegen des Verlaufs der Fermischen Verteilungsfunktion in sehr guter Näherung durch die spektrale Leitfähigkeit $\sigma_{ij}(E = \zeta)$ ersetzt werden [vgl. (7)]. Demzufolge sind künftig alle Größen an der Stelle $E = \zeta$ zu nehmen.

Zunächst wird die komplexe Zahl $L = L' + iL''$ und die Dissipationskonstante $\kappa = \text{Im } \Delta k_\zeta$ aus Gl. (25) berechnet. Wie im Anhang mittels Residuenmethode gezeigt wird, erhält man (I_ν sind Bessel-Funktionen)

$$L' = (v_0/\zeta) \left[\frac{3}{2} \pi I_{\frac{3}{2}}(k_\zeta r_s) I_{-\frac{3}{2}}(k_\zeta r_s) + 1 \right] \cdot [1 + O(\Delta k_\zeta/k_\zeta)] \quad (26)$$

$$L'' = -\frac{3}{2} \pi I_{\frac{3}{2}}^2(k_\zeta r_s) [1 + O(\Delta k_\zeta/k_\zeta)].$$

κ kann jetzt aus (25) ermittelt werden, wenn die Beziehung

$$\left\langle \frac{C_p}{1 - C_p L} \right\rangle = m_{\text{Cu}} \frac{C_{\text{Cu}}}{1 - C_{\text{Cu}} L} + m_{\text{Au}} \frac{C_{\text{Au}}}{1 - C_{\text{Au}} L}$$

beachtet wird. Mit den im nächsten Kapitel angegebenen Daten für Cu_3Au ergibt sich für κr_s ein numerischer Wert von $\approx 0,0046$. Hieraus und aus (25) folgt weiter

$$|\Delta k_\zeta/k_\zeta| \approx \kappa/k_\zeta \approx 3 \cdot 10^{-3}.$$

Dies bedeutet, daß Cu_3Au und vergleichbare Legierungen, hinsichtlich der im Propagator bzw. der Streumatrix zu berücksichtigenden Selbstenergieeffekte, als Systeme geringer Störstellendichte angesehen werden dürfen. Wir werden nun der Reihe nach die einzelnen Beiträge zum Leitfähigkeitstensor berechnen.

a) Die Terme (8 a) und (9 a) sind, da sie von der Störstellenkonfiguration unabhängig sind, als Beitrag der inkohärenten Streuung zu betrachten. Wegen (7) lautet der entsprechende Ausdruck für σ_{ij} :

$$\sigma_{ij}^{\text{inkohärent}} = -\frac{\delta_{ij}}{3} \frac{\hbar^3}{\pi} \frac{e^2}{m^2} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k^2 (\text{Re } D_{\mathbf{k}}^2(\zeta) - |D_{\mathbf{k}}(\zeta)|^2). \quad (27)$$

Da $|\Delta k_z/k_z| \ll 1$ ist, darf die „ k “-Summe in (27) in der gleichen Näherung wie in Teil I berechnet werden [vgl. I, Diskussion zu (50), ferner (I,45)]. Man erhält

$$\sigma_{ij}^{\text{inkohärent}} = \delta_{ij} (e^2 k_z^2 / 6 \pi^2 \hbar \kappa) [1 + O(\Delta k_z/k_z)] \quad (28)$$

β) In den kohärenten Interferenztermen $K_{ij}^{(1A)}$ und $K_{ij}^{(1D)}$ sind die Störstellen unkorreliert. Die Mittelwerte über die Produkte der Streumatrizen τ_p hängen deshalb nicht vom Ort \mathbf{R}_p der Störstellen ab. In $K_{ij}^{(1A)}$ bleibt als Gittersumme

$$\sum_p \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_p\},$$

in $K_{ij}^{(1D)}$ der Ausdruck

$$\sum_{p \neq p'} \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{R}_p - i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_{p'}\},$$

die beide eine translationsinvariante Störstellenverteilung vortäuschen. Der Einfluß der beiden Streuprozesse auf den Restwiderstand sollte deshalb vernachlässigbar sein (ein exaktes Verschwinden darf nicht erwartet werden, da der Propagator D_k weiterhin ein dissipatives System beschreibt). Eine genauere Abschätzung, in der sich die Bedingungen $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ bzw. $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}'$ als wesentlich herausstellen, wurde vom Verfasser⁹ in D, Anhang V durchgeführt. Es ergibt sich, daß der Beitrag von $K_{ij}^{(1A)}$ um einen Faktor 10^{-5} , der von $K_{ij}^{(1D)}$ um den Faktor 10^{-8} kleiner ist als $\sigma_{ij}^{\text{inkohärent}}$.

γ) Der erste kohärente Term mit merklichem Beitrag stammt von den Streuprozessen der Abb. 1C. Der entsprechende Ausdruck $K_{ij}^{(1C)}$ lautet nach Durchführung der Winkelintegrationen bezüglich \mathbf{k} und \mathbf{k}' (da die \mathbf{k} -Werte beliebig dicht liegen, ist die Beschränkung $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$, wenn nur über endlich viele Störstellen summiert wird, ohne Wirkung)

$$K_{ij}^{(1C)} = \frac{\delta_{ij}}{3(2\pi)^3} n \int_0^\infty dk k^3 |D_k|^2 \int_0^\infty dk' k'^3 |D_{k'}|^2 \quad (29)$$

$$\sum_{p \neq 0} \langle \tau_p^*(k, k') \tau_p(k, k') \rangle_{\text{kor.}} \cdot \frac{I_{\frac{3}{2}}(k R_p) I_{\frac{3}{2}}(k' R_p)}{\sqrt{k R_p} \sqrt{k' R_p}}.$$

Führt man anstelle der Streumatrizen τ_p die expliziten Ausdrücke (22) und (20) ein, so ergibt sich

$$K_{ij}^{(1C)} = \frac{\delta_{ij}}{3(2\pi)^3} n (6 \pi^2 r_s^3 v_0)^2 \sum_{p \neq 0} \cdot \left\langle \frac{C_0 C_p}{(1 - C_0 L^*)(1 - C_p L)} \right\rangle_{\text{kor.}} J^2(R_p), \quad (30)$$

wobei $J(R_p)$ gegeben ist durch

$$J(R_p) = \int_0^\infty dk k^3 |D_k|^2 \frac{I_{\frac{3}{2}}^2(k r_s) I_{\frac{3}{2}}^2(k R_p)}{(k r_s)^3 \sqrt{k R_p}}. \quad (31)$$

In der Näherung $|\Delta k_z/k_z| \ll 1$ kann die Funktion $|D_k(\zeta)|$ im Integranden von (31) durch den Ausdruck $(m/\hbar^2 k_z)^2 (\pi/\kappa) \delta(k - k_z)$ ersetzt werden [vgl. I, Gl. (45)]. Man erhält

$$J(R_p) = \pi \left(\frac{m}{\hbar^2 k_z} \right)^2 \frac{I_{\frac{3}{2}}^2(k_z r_s) I_{\frac{3}{2}}^2(k_z R_p)}{\kappa r_s^3 \sqrt{k_z R_p}} \cdot \left[1 + O\left(\frac{\Delta k_z}{k_z}\right) \right]. \quad (32)$$

Schließlich ergibt sich für $K_{ij}^{(1C)}$, wenn (32) und der korrelierte Mittelwert gemäß (3b) eingesetzt wird:

$$K_{ij}^{(1C)} = \delta_{ij} \frac{2}{\pi} K m_{\text{Cu}} m_{\text{Au}} \cdot \left| \frac{m_{\text{Au}}}{1 - m_{\text{Au}} L} + \frac{m_{\text{Cu}}}{1 + m_{\text{Cu}} L} \right|^2 \sum_i j_1^2(x_i) c_i a_{0,i}. \quad (33)$$

Dabei ist

$$K = \frac{3}{8} \pi^3 \left(\frac{v_0}{\zeta} \right)^2 \frac{m^2}{\hbar^4} n \frac{1}{\kappa^2} I_{\frac{3}{2}}^4(k_z r_s) \quad (34)$$

und j_1 eine Sommerfeld-Funktion. Weiter ist $x_i = k_z R_i$, wobei der Index i die Abstandsschalen $(a/\sqrt{2})(1/\sqrt{1}, 1/\sqrt{2}, \dots, 1/\sqrt{i}, \dots)$ des kubisch flächenzentrierten Gitters durchnumeriert; c_i ist die Anzahl kubisch äquivalenter Gitterpunkte und $a_{0,i}$ der Nahordnungsparameter für zwei im Nullpunkt bzw. auf der i . Schale befindliche Störstellen.

δ) Wir berechnen nun die Terme $K_{ij}^{(1I+1J)}$ und $K_{ij}^{(1K)}$, die die Interferenz der einfach gestreuten mit zweifach gestreuten Wellen darstellen. In beiden Termen tritt eine Störstellensumme vom Typ $\sum_{|\mathbf{R}_{ps}| > s} \exp\{-i \mathbf{b} \cdot \mathbf{R}_p\}$ mit $\mathbf{b} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'$ bzw. $\mathbf{b} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ auf. Wir zerlegen sie in Summen vom Typus $\sum_{p \mid |\mathbf{R}_p| \leq s} - \sum_{p \mid |\mathbf{R}_p| > s}$.

Die erste Summe führt aus den gleichen Gründen wie bei $K_{ij}^{(1A)}$ zu einem vernachlässigbaren Beitrag. Es ist also nur der Ausdruck $-\sum$ zu berücksichtigen. Um die in den Gleichungen für $K_{ij}^{(1I+1J)}$ und $K_{ij}^{(1K)}$ auftretenden Summationen über \mathbf{k} , \mathbf{k}' und \mathbf{k}_1 auszuführen, verwenden wir die aus den Gl. (22) und (20) resultierenden, expliziten Ausdrücke für die Streumatrizen τ_p . Es zeigt sich, daß die einzelnen „ k “-Summen sowohl für $K_{ij}^{(1I+1J)}$ wie für $K_{ij}^{(1K)}$ von gleicher Struktur sind. Die \mathbf{k}_1 -Summe, die wir mit

$$Q(\mathbf{R}_p) = \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} \exp\{-i \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_p\} D_{\mathbf{k}_1} \frac{I_{\frac{3}{2}}^2(k_1 r_s)}{(k_1 r_s)^3} \quad (35)$$

abkürzen wollen, wird im Anhang berechnet. Die Winkelintegrationen bezüglich \mathbf{k} und \mathbf{k}' sind von der Form

$$\begin{aligned} J(\mathbf{R}_p, \mathbf{R}_{p'}) &= \int d\Omega_{\mathbf{k}} d\Omega_{\mathbf{k}'} \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \\ &\cdot \exp\{-i \mathbf{k}'(\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'})\} \exp\{i \mathbf{k} \mathbf{R}_p\} \\ &= (2\pi)^3 k k' \\ &\cdot \cos \vartheta(\mathbf{R}_p; \mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}) \frac{I_{\frac{3}{2}}(k R_p) I_{\frac{3}{2}}(k' |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|)}{\sqrt{k R_p} \sqrt{k' |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|}} \end{aligned} \quad (36)$$

Dabei bedeutet $\vartheta(\mathbf{R}_p; \mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'})$ den Winkel zwischen den Vektoren \mathbf{R}_p und $\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}$. Die restlichen Integrationen sind vom Typ $\int_0^\infty dk |D_k|^2 f(k)$ und können, da $|D_k|^2$ näherungsweise proportional einer Delta-Funktion ist, unmittelbar berechnet werden. Dabei reproduzieren sich die in Gl. (36) auftretenden Funktionen, wobei lediglich k und k' durch k_z zu ersetzen sind. Bevor wir das Endergebnis angeben, gehen wir noch etwas näher auf die Winkelabhängigkeit bez. \mathbf{R}_p und $\mathbf{R}_{p'}$ des Ausdrucks (36) ein. Für $\mathbf{R}_{p'} = 0$ erhält man

$$J(\mathbf{R}_p, \mathbf{R}_{p'} = 0)_{k=k'=k_z} = (2\pi)^3 k_z^2 \frac{I_{\frac{3}{2}}(k_z R_p)}{k_z R_p}. \quad (37)$$

Im Falle $0 \neq \mathbf{R}_{p'} \neq \mathbf{R}_p$ formen wir wie folgt um

$$\begin{aligned} &\frac{I_{\frac{3}{2}}(k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|)}{\sqrt{k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|}} \cos \vartheta(\mathbf{R}_p; \mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}) \\ &= \frac{I_{\frac{3}{2}}(k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|)}{(k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|)} (k_z R_p - k_z R_{p'} \cos \vartheta(\mathbf{R}_p; \mathbf{R}_{p'})). \end{aligned} \quad (38)$$

Den Quotienten auf der rechten Seite von Gl. (38) ersetzen wir nun entsprechend der Separationsnäherung von (18) und (19) durch einen winkelunabhängigen Ausdruck. Da die übrigen Faktoren in $K_{ij}^{(1I+1J)}$ und $K_{ij}^{(1K)}$ nur noch von den Beträgen der Vektoren \mathbf{R}_p und $\mathbf{R}_{p'}$ abhängen, verschwindet, wenn über \mathbf{R}_p und $\mathbf{R}_{p'}$ summiert wird, der Kosinus-Term in (38) wegen der kubischen Symmetrie. Es ergibt sich näherungsweise im Fall $0 \neq p' \neq p$

$$\begin{aligned} &\frac{I_{\frac{3}{2}}(k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|)}{\sqrt{k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|}} \cos \vartheta(\mathbf{R}_p; \mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}) \\ &\approx 3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{I_{\frac{3}{2}}(k_z R_p)}{\sqrt{k_z R_p}} \frac{I_{\frac{3}{2}}(k_z R_{p'})}{(k_z R_{p'})^{3/2}}. \end{aligned} \quad (39)$$

Das Endergebnis lautet:

$$\begin{aligned} a) \quad K_{ij}^{(1I+1J)} &\approx -K_{ij}^{(1C)} 12 \pi^2 v_0 r_s^3 \left[Q(0) + \sum_{0 \neq |\mathbf{R}_{p'}| \leq s} Q(R_{p'}) 3 \frac{j_1(k_z R_p)}{k_z R_p} \right] \left\langle \frac{C_0}{1 - C_0 L} \right\rangle + \text{konj. kompl.}, \\ b) \quad K_{ij}^{(1K)} &\approx \delta_{ij} K 9 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{v_0}{\zeta} I_{\frac{3}{2}}(k_z r_s) \sum_{|\mathbf{R}_p| \leq s} j_1^2(k_z R_p) \left\langle \frac{C_0}{1 - C_0 L^*} \right\rangle \\ &\cdot \sum_{p' \neq 0} \frac{\exp\{i k_z R_{p'}\}}{k_z R_{p'}} \frac{I_{\frac{3}{2}}(k_z R_{p'})}{(k_z R_{p'})^{3/2}} \left\langle \frac{C_0 C_{p'}}{(1 - C_0 L)(1 - C_{p'} L)} \right\rangle^{\text{kor.}} + \text{konj. kompl.} \end{aligned} \quad (40)$$

ε) Mit analogen Methoden wie im vorigen Abschnitt ergibt sich für den Ausdruck $K_{ij}^{(1L)}$, der die Streuung an drei miteinander korrelierten Störstellen beschreibt.

$$K_{ij}^{(1L)} = -\delta_{ij} K \frac{12}{\pi} \frac{v_0}{\zeta} \frac{j_1^2(k_z r_s)}{a k_z} (\Phi_{\text{Re}} - \Phi_{\text{Im}}) \quad (41)$$

mit

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{Re}} &= \sum_{p \neq p'} \cos \vartheta(\mathbf{R}_p; \mathbf{R}_{p'}) \\ &\cdot \cos(k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|) \left| \frac{a}{\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}} \right| \\ &\cdot j_1(k_z R_p) j_1(k_z R_{p'}) \langle F \rangle_{\text{Re}}^{\text{kor.}}, \\ \Phi_{\text{Im}} &= \sum_{p \neq p'} \cos \vartheta(\mathbf{R}_p; \mathbf{R}_{p'}) \\ &\cdot \sin(k_z |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}|) \left| \frac{a}{\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_{p'}} \right| \\ &\cdot j_1(k_z R_p) j_1(k_z R_{p'}) \langle F \rangle_{\text{Im}}^{\text{kor.}} \end{aligned}$$

$$\text{und} \quad F = \frac{C_0 C_p C_{p'}}{(1 - C_0 L^*)(1 - C_p L)(1 - C_{p'} L)}.$$

5. Numerische Ergebnisse und Diskussion

Aus der Arbeit von GIBSON² entnehmen wir folgende Daten für Cu₃Au: Fermi-Energie $\zeta = 10,66 \cdot 10^{-12}$ erg, Gitterkonstante $a = 3,72$ Å, Potentialstärke $v_0 = V_{\text{Cu}} - V_{\text{Au}} = 2,45 \cdot 10^{-12}$ erg, $k_z r_s = 1,92$ und Konzentrationen $m_{\text{Cu}} = 3/4$ bzw. $m_{\text{Au}} = 1/4$. Für die Nahordnungsparameter $a_{0,i}$ verwenden wir Werte, die von COWLEY⁶ aus röntgenographischen Meßwerten für die ersten zehn Abstandsschalen und drei verschiedene Nahordnungsphasen (Temperatur vor dem Abschrecken $T = 405$ °C bzw. 460 °C bzw. $T = 550$ °C) berechnet wurden. Diese Zahlenwerte für $a_{0,i}$ sind in der Arbeit von GIBSON² nochmals zusammengestellt. Die numerischen Resultate geben wir für den Restwiderstand an, wobei wir die Abkürzungen ϱ_0 für $(\sigma^{\text{inkohärent}})^{-1}$, $\varrho^{(1X)}$ für den die Streuprozesse 1X enthaltenden Gesamtwiderstand und $\Delta \varrho^{(1X)} = \varrho^{(1X)} - \varrho_0$ verwen-

Temperatur	405°C			460°C			550°C		
Zahl der berücksichtigten Schalen	3	4	10	3	4	10	3	4	10
$\Delta\varrho^{1c}/\varrho_0 \approx \Delta\varrho/\varrho_0$	0,148	0,130	0,139	0,134	0,122	0,122	0,112	0,102	0,102
$\Delta\varrho/\varrho_0$ (Boltzmann-Gl. ²)			0,177			0,167			0,127

Tab. 4. Berechnete Werte für den Nahordnungseffekt bei Cu_3Au . $\Delta\varrho$ bedeutet die durch Nahordnung bedingte Widerstandsänderung.

den. Es ergibt sich

$$\varrho_0 \approx 4,2 \cdot 10^{-6} \Omega \text{ cm} \quad (42)$$

(gemessen¹ wurde $\varrho_0 = 9,6 \cdot 10^{-6} \Omega \text{ cm}$).

Die berechneten Werte für die durch die Streuprozesse 1C verursachte, relative Änderung $\Delta\varrho^{(1C)}/\varrho_0$ sind in der 3. Zeile von Tab. 4 zusammengefaßt. Man sieht, daß geringe Abweichungen auftreten, wenn anstelle von 10 nur 4 Abstandsschalen bei der Summation über die Ortsvektoren \mathbf{R}_p mitgenommen werden. Die Beiträge der Prozesse 1I, 1J, 1K und 1L berechnen wir für die Nahordnung bei $T = 405^\circ\text{C}$ unter Berücksichtigung von 4 Schalen. Ferner werden die für die Auswertung von $\langle F \rangle^{\text{kor.}}$ [Gl. (41)] benötigten Wahrscheinlichkeiten gemäß Tab. 3 durch die Intervallmittelpunkte des zulässigen Wertebereichs ersetzt. Man erhält

$$\Delta\varrho^{(1I+1J+1K)} \approx 0,055 \Delta\varrho^{(1C)} \quad (43)$$

$$\text{und } \Delta\varrho^{(1L)} \approx -0,088 \Delta\varrho^{(1C)}. \quad (44)$$

Die in der Boltzmann-Gleichung nicht vorhandenen Interferenzterme mit 3 Störstellen bringen also im Vergleich zum Streuprozess 1C insgesamt nur einen

Effekt von -3% . Ferner ist bemerkenswert, daß die miteinander konkurrierenden Prozesse 1L bzw. 1I + 1J + 1K die gleiche Größenordnung aufweisen und einander entgegenwirken. In diesem Fall darf also die Drei-Störstellen-Korrelation nicht gegenüber der nur 2 Störstellen berührenden Korrelation vernachlässigt werden. Eine entsprechende Situation ist auch bei Streuprozessen höherer Ordnung, an denen, neben anderen, vier oder mehr miteinander korrelierte Störstellen beteiligt sein können, denkbar. Es ist deshalb nicht berechtigt, zumindest solange nicht durch konkrete — sicherlich sehr umfangreiche — Rechnungen das Gegenteil nachgewiesen ist, die Zwei-Störstellen-Korrelation allein in beliebig hoher Ordnung mitzunehmen, wie dies z. B. bei der Methode der Boltzmann-Gleichung (vgl. Abb. 2) der Fall ist. Hieraus folgt, daß zur Berechnung des Restwiderstandes von Legierungen nur die von der inkohärenten Streuung herrührenden Terme (8a) und (9a) sowie die Streuprozesse 1C untersucht zu werden brauchen. Der entsprechende Ausdruck für den Leitfähigkeitstensor lautet in allgemeiner Form

$$\sigma_{ij}(\zeta) = -\frac{\hbar e^2}{\pi} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar k_i}{m} \frac{\hbar k_j}{m} (\text{Re } D_{\mathbf{k}}^2(\zeta) - |D_{\mathbf{k}}(\zeta)|^2) \quad (45)$$

$$- \frac{\hbar e^2}{\pi} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \frac{1}{V^2} |D_{\mathbf{k}}|^2 |D_{\mathbf{k}'}|^2 \frac{\hbar k_i}{m} \frac{\hbar k_j'}{m} \sum_{p, p'} \tilde{t}_p^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \zeta) \tilde{t}_{p'}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \zeta);$$

gegebenenfalls hat man noch die Geschwindigkeitskomponenten $\hbar k_i/m$ durch $(1/\hbar)(\text{grad}_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})_i$ zu ersetzen. Da $|D_{\mathbf{k}}(\zeta)|^2$ in den meisten Fällen proportional der Delta-Funktion $\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \zeta)$ gesetzt werden darf, bedeutet der Ausdruck (45), der quantenmechanisch begründet wurde, eine Vereinfachung gegenüber der Methode der Boltzmann-Gleichung.

Abschließend versuchen wir, die berechneten Zahlenwerte für die relative Widerstandsänderung $\Delta\varrho/\varrho_0$ mit dem Experiment zu vergleichen. Wegen der im Laufe der Rechnungen gemachten Näherun-

gen — freie Elektronen, separables Potential — erwarten wir bestenfalls eine größenordnungsmäßige Übereinstimmung. Für den Vergleich verwenden wir eine von DAMASK¹ erhaltene Meßkurve, in der die relative Widerstandsänderung $\Delta\varrho'/\varrho(T_c) = [1/\varrho(T_c)](\varrho(T_c) - \varrho(T))$ gegen die Abschreckungstemperatur T aufgetragen ist. (Man beachte, daß hier — anders als in der vorliegenden Arbeit — $\Delta\varrho'$ auf $\varrho(T_c)$, den Widerstand bei optimaler Nahordnung, bezogen ist.) Die gemessene Kurve für $\Delta\varrho'/\varrho(T_c)$ fällt zunächst mit wachsendem T mono-

ton ab. Wenn man die Temperaturabhängigkeit der Cowly-Parameter berücksichtigt, findet man denselben Gang sowohl bei unseren (vgl. Tab. 4) als auch bei den von GIBSON durchgeführten theoretischen Untersuchungen. Abweichend von den theoretischen Ergebnissen nehmen jedoch die Werte von $\Delta Q'$ für $T \gtrsim 480^\circ\text{C}$ wieder zu. Der Kurvenknick liegt nahe demjenigen Temperaturgebiet, in dem, wegen zu hoher Abschrecktemperaturen (das Abschrecken erfolgte im Experiment auf die Temperatur von flüssigem Stickstoff) und dadurch in der Probe hervorgerufener Schäden, keine reproduzierbaren Meßergebnisse erhalten werden konnten. Nach DAMASK wird das Abbiegen der Kurve nicht durch Nahordnungseffekte verursacht. Da die theoretische Untersuchung nur für die Temperaturen $T = 405^\circ\text{C}$, 460°C und 550°C durchgeführt wurden, für die Nahordnungsparameter zur Verfügung standen, da aber andererseits der Fall $T = 550^\circ\text{C}$ experimentell nicht erreicht wird, kommt für einen Vergleich von Theorie und Experiment lediglich der Quotient $D = 1/\varrho_0 (\varrho(T = 405^\circ) - \varrho(T = 460^\circ))$ in Betracht. Es ergibt sich, wenn ϱ_0 im Nenner von D auf den theoretisch erhaltenen Wert bezogen wird, $D_{\text{gemessen}} = 9 \cdot 10^{-3}$, während die von uns bzw. die mit der Methode der Boltzmann-Gleichung² erhaltenen Ergebnisse zu $D = 1,7 \cdot 10^{-2}$ bzw. $D_{\text{Boltzm.}} = 10^{-2}$ führen.

Herrn Professor Dr. H. BROSS möchte ich sowohl für die Anregung zu dieser Untersuchung als auch für die vielen klärenden Diskussionen herzlich danken. Für die Durchführung einiger umfangreicher numerischer Rechnungen spreche ich Frl. A. ZINNER meinen Dank aus.

Anhang

Wir berechnen den Ausdruck

$$Q(x) = \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} \exp\{-i \mathbf{k}_1 \mathbf{x}\} \cdot D_{\mathbf{k}_1} \frac{I_{\frac{3}{2}}^2(k_1 r_s)}{(k_1 r_s)^3} \quad (1)$$

für die beiden Fälle $x = 0$ und $x > 2 r_s$. Mit der Konstanten L besteht die Verknüpfung

$$L = 6 \pi^2 r_s^3 v_0 Q(0). \quad (2)$$

1. Fall $x = 0$

In der Näherung von Kap. 3 hängt $D_{\mathbf{k}_1}$ nur vom Betrag des Vektors \mathbf{k}_1 ab. Da der Integrand eine gerade Funktion von k_1 ist, gilt somit

$$Q(0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r_s^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k} D_k I_{\frac{3}{2}}^2(k r_s). \quad (3)$$

Eine zunächst triviale Umformung liefert weiter

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \dots = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{-\varepsilon} dk \dots + \int_{\varepsilon}^{+\infty} dk \dots \right] = P \int_{-\infty}^{+\infty} dk \dots, \quad (4)$$

wobei P Hauptwert bedeutet. Im Integranden (4) drücken wir nun eine Bessel-Funktion durch die Hankel-Funktionen 1. und 2. Art aus:

$$I_{3/2} = \frac{1}{2} (H_{3/2}^{(1)} + H_{3/2}^{(2)}).$$

Wegen der Paritätseigenschaft¹⁰

$$H_{3/2}^{(2)}(e^{i\pi} z) = e^{3/2 \pi i} H_{3/2}^{(1)}(z) \quad (5)$$

kann der Term $H_{3/2}^{(2)}$ im Integranden durch die Substitution $k \rightarrow -k$ in den Term $H_{3/2}^{(1)}$ übergeführt werden. Man erhält

$$Q(0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r_s^3} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k} D_k I_{3/2}(k r_s) H_{3/2}^{(1)}(k r_s). \quad (6)$$

Der Integrationsweg kann jetzt über die obere Halbebene geschlossen werden (vgl. Abb. 4). Das Integral in (6) ist gleich dem $2\pi i$ Residuum ($k =$

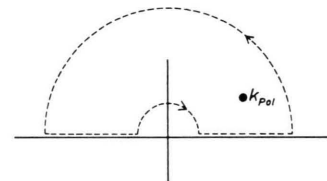


Abb. 4. Integrationsweg zur Berechnung von $Q(0)$. K_{Pol} ist eine Polstelle des Propagators D_k .

k_{Pol}) minus dem Beitrag vom kleinen Halbkbogen. Man erhält in der Näherung $|\Delta k_z/k_z| \ll 1$

$$Q(0) = -\frac{i}{2\pi} \frac{1}{r_s^3} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{k_z^2} I_{3/2}(k_z r_s) H_{3/2}^{(1)}(k_z r_s) + \frac{1}{6\pi^2} \frac{1}{r_s^3} D_{k=0}(\zeta). \quad (7)$$

2. Fall $x > 2 r_s$

$$Q(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{i x r_s^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k^2} I_{\frac{3}{2}}^2(k r_s) \exp\{i k x\}. \quad (8)$$

Der Integrationsweg kann unmittelbar über die obere Halbebene geschlossen werden. Man erhält für $|\Delta k_z/k_z| \ll 1$

$$Q(x) = -\frac{1}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{x(k_z r_s)^3} I_{\frac{3}{2}}^2(k_z r_s) \exp\{i k_{\text{Pol}} x\}. \quad (9)$$