ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ/CONDENSED MATTER PHYSICS

DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.162

ОСТАТОЧНОЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ С ВАКАНСИЯМИ

Научная статья

Бородин К.И.[1,] *, Волков В.А.[2]
[1] ORCID : 0000-0001-5536-4256;
[2] ORCID : 0000-0002-7955-959X;
[1] Институт физики металлов им. Н. А. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Российская Федерация
[2] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор (bkimm[at]mail.ru)

Аннотация

В приближении когерентного потенциала изучено влияние вакансий на остаточное электросопротивление упорядочивающихся и неупорядоченных сплавов, а также чистых металлов. Для упорядочивающихся и неупорядоченных сплавов это сделано в пределе слабого рассеяния в системе A-B атомов с учетом малости концентрации вакансий, но при этом рассеяние на вакансиях учитывалось точно. Для неупорядоченных сплавов выполнены численные расчеты без использования разложений по малому параметру. Делается вывод, что появление вакансий приводит к увеличению остаточного электросопротивления при любых концентрациях компонент сплава и любых значениях степени дальнего порядка. Для чистых металлов получено точное аналитическое решение задачи. Рассчитанные значения вакансионного вклада в сопротивление для Cu, Ag, Au, Pb, Al находятся в согласии с экспериментальными данными.

Ключевые слова: остаточное электросопротивление, вакансии, упорядочивающиеся сплавы, неупорядоченные сплавы замещения, приближение когерентного потенциала.

RESIDUAL ELECTRICAL RESISTANCE OF METALS AND ALLOYS WITH VACANCIES

Research article

Borodin K.I.[1,] *, Volkov V.A.[2]
[1] ORCID : 0000-0001-5536-4256;
[2] ORCID : 0000-0002-7955-959X;
[1] M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation
[2] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation

* Corresponding author (bkimm[at]mail.ru)

Abstract

The influence of vacancies on the residual electrical resistance of ordered and disordered alloys, as well as pure metals, has been studied in the coherent potential approximation. For ordered and disordered alloys, this was done in the limit of weak scattering in the A-B system of atoms, taking into account the smallness of the vacancy concentration, but at the same time the scattering on vacancies was taken into account accurately. Numerical calculations are performed for disordered alloys without the use of small parameter expansions. It is concluded that the appearance of vacancies leads to an increase in residual electrical resistance at any concentrations of the alloy components and any values of the degree of long-range order. An exact analytical solution of the problem is obtained for pure metals. The calculated values of the vacancy contribution to resistance for Cu, Ag, Au, Pb, Al are in agreement with experimental data.

Keywords: residual electrical resistance, vacancies, ordered alloys, disordered substitution alloys, coherent potential approximation.

Введение

После длительного отжига при достаточно высоких температурах в металлах и сплавах устанавливается довольно высокая концентрация равновесных вакансий, которая может достигать величин порядка 0,1 – 1 атомного процента при температурах, близких к точке плавления [1]. Быстрая закалка металлов и сплавов позволяет сохранить «термические» вакансии и при достаточно низких температурах. Как и другие несовершенства кристаллической решетки, неравновесные вакансии будут вносить свой вклад в остаточное сопротивление металлов и сплавов.

Влияние вакансий на остаточное электросопротивление сплавов изучалось в [2] (для полностью неупорядоченных сплавов) и в [3], [4] (для частично упорядоченных сплавов). Расчеты проводились в рамках метода кинетического уравнения, который применим лишь при условии малости потенциала рассеяния. В случае рассеяния на вакансиях это условие заведомо не выполняется [5]. Поэтому результаты работ [2], [3], [4] носят чисто качественный характер и не могут быть применены к реальным сплавам.

В теории сплавов широко используется приближение когерентного потенциала (ПКП) [6], в котором нет ограничений на потенциал рассеяния. Целью данной работы является применение ПКП для расчета остаточного электросопротивления упорядочивающихся и неупорядоченных сплавов, а также металлов с вакансиями.

Остаточное электросопротивление бинарных упорядочивающихся сплавов детально исследовалось нами в [7]; для тройных упорядочивающихся сплавов этот вопрос рассмотрен в работах [8], [9]. Влияние различных факторов на концентрацию вакансий в сплавах исследовалось нами в [10], [11], [12], [13].

Остаточное электросопротивление бинарных упорядочивающихся сплавов с вакансиями

Обратимся к изучению бинарного упорядочивающегося сплава (БУС) ОЦК-структуры с вакансиями, пренебрегая при этом геометрическими искажениями решетки вблизи вакансий. Интересуясь удельными характеристиками сплава, рассмотрим основную область кристалла, содержащую N узлов. В этом случае когерентные потенциалы подрешеток могут быть найдены из уравнений ПКП для тройных упорядочивающихся сплавов (ТУС) (см. [8]), модифицированных с учетом того, что роль атомов третьей компоненты в исследуемой системе теперь играют вакантные узлы. Обозначим через $p'_{\beta l}$ вероятность того, что узел l–й подрешетки занят либо атомом $\beta(\beta = A, B)$, либо вакансией $(\beta = V)$. Величины p'_{Vl} имеют порядок концентрации вакансий в сплаве, поэтому $p'_{vl} \ll 1$.

Выпишем t-матрицу рассеяния вакантного узла l–й подрешетки

$$t_{Vl}(z) = \frac{\varepsilon_V - \sigma^{(l)}(z)}{1 - \left(\varepsilon_V - \sigma^{(l)}(z)\right) F_l(z)} \tag{1}$$

В этой формуле ε_V – «атомный уровень» вакантного узла, $\sigma^{(l)}(z)$ – когерентный потенциал, l-й подрешетки, функция $F_l(z)$ задается соотношениями

$$\begin{gathered} F_l(z) = \Lambda(z)\left(z - \sigma^{(l)}(z)\right)^{-1} F_0(\Lambda(z)) \\ \Lambda^2(z) = \left(z - \sigma^{(1)}(z)\right)\left(z - \sigma^{(2)}(z)\right), F_0(z) = 2\left(z - \sqrt{z^2 - 1}\right). \end{gathered} \tag{2}$$

Здесь плотность электронных состояний, соответствующая трансляционно-инвариантному гамильтониану, аппроксимирована полуэллиптической кривой с полушириной равной единице.

Величины $F_l(z)$ имеют порядок единицы (в единицах полуширины зоны проводимости). Как уже указывалось, $\varepsilon_V \gg 1$ (в тех же единицах). В работе [5] было даже принято $\varepsilon_V = \infty$. Тогда $\left|\left(\varepsilon_V - \sigma^{(l)}(z)\right) F_l(z)\right| \gg 1$, и, пренебрегая единицей в знаменателе (1), получим

$$t_{Vl}(z) = -\frac{1}{F_l(z)} = -\left(F_l(z)\right)^{-1} \tag{3}$$

Это соотношение при описании сплавов без вакансий обычно называют пределом сильного рассеяния [6], [7]. Отметим, что предел сильного рассеяния неприменим для описания металлических сплавов без вакансий, существующих во всем концентрационном диапазоне, т.к. в этом приближении при некоторой концентрации сплав неизбежно теряет металлические свойства. По-видимому, формула (3) дает адекватное описание именно в случае рассеяния электронов на вакансиях.

С учетом сказанного, уравнения для нахождения когерентных потенциалов подрешеток $\sigma^{(l)}(z)$ приобретают вид [8]:

$$p'_{Al}\frac{\varepsilon_A - \sigma^{(l)}}{1 - \left(\varepsilon_A - \sigma^{(l)}\right) F_l} + p'_{Bl}\frac{\varepsilon_B - \sigma^{(l)}}{1 - \left(\varepsilon_B - \sigma^{(l)}\right) F_l} - \frac{p'_{Vl}}{F_l} = 0, \quad l = 1, 2. \tag{4}$$

Система уравнений (4) описывает ТУС, в котором локализация электронов вблизи атомов третьей компоненты (вакансий) невозможна.

Далее мы исследуем аналитически случай слабого рассеяния в системе *A*-*B*атомов, полагая $\delta\varepsilon_{AB} = \delta = \varepsilon_A - \varepsilon_B \ll 1$, однако рассеяние на вакансиях будем учитывать точно. Здесь ε_α – атомный уровень компоненты a нашего сплава $(\alpha = A, B)$. В пределе слабого рассеяния уравнения для когерентных потенциалов решаются итерациями, малым параметром задачи при этом является величина δ. В нашей модели БУС с вакансиями помимо δ малыми будут также величины p'_{vl}. Проведем итерационное решение уравнений (4) с точностью до членов, квадратичных по δ и линейных по p'_{vl}. Рассмотрим случай, когда энергия Ферми $\mathcal{E}_F$ находится далеко от щели, появляющейся в приближении виртуального кристалла в плотности электронных состояний сплава. В итоге для величины

$$\Delta(E) = -\frac{1}{2}\left(\operatorname{Im}\sigma^{(1)}(E + i0) + \operatorname{Im}\sigma^{(2)}(E + i0)\right) \tag{5}$$

приходим к формуле

$$\Delta\left(\varepsilon_F\right) = 2\sqrt{1 - \left(\varepsilon_F - \bar{\varepsilon}\right)^2} \cdot \left[\delta^2\left(c_A c_B - \frac{\eta^2}{4}\right) + \frac{c_{V1} + c_{V2}}{8}\right], \tag{6}$$

в которой, $\bar{\varepsilon} = c_A\varepsilon_A + c_B\varepsilon_B, c_\alpha = \frac{N_\alpha}{N}, N = N_A + N_B, N_\alpha$ – число атомов сорта a в сплаве, $c_{Vl} = \frac{2n_l}{N}, n_l$ – число вакансий на l-й подрешетке, c_a концентрация атомов сорта a в сплаве, c_{Vl} – концентрация вакансий на l-й подрешетке, η – параметр дальнего порядка для БУС-ОЦК без вакансий.

В работе [14] было показано, что в пределе слабого рассеяния в системе *A*-*B*атомов в случае, когда энергия Ферми находится вдали от щели в плотности электронных состояний, электросопротивление ρ БУС

пропорционально $\Delta(\varepsilon_F)$. Поскольку в ходе преобразований мы удерживаем лишь первые неисчезающие члены, имеющие порядок δ^2 и c_{Vl}, можно считать, что коэффициент пропорциональности между этими величинами не зависит от δ и c_{Vl}. Таким образом для остаточного электросопротивления БУС с вакансиями получаем

$$\rho = \rho_{al} + \rho_V \tag{7}$$

$$\rho_{al} = \rho^* \cdot \delta^2 \left(c_A c_B - \frac{\eta^2}{4}\right), \tag{8}$$

$$\rho_V = \rho^* \cdot \frac{c_{V1}+c_{V2}}{8}, \tag{9}$$

где ρ_{al} – электросопротивление БУС без вакансий, ρ_V – вклад в остаточное электросопротивление, обусловленный вакансиями, ρ^* – коэффициент пропорциональности, не зависящий от δ и c_V.

Как видно из формул (7) – (9), в рассмотренном нами приближении вакансии приводят к увеличению остаточного электросопротивления сплава при любых концентрациях компонент и любых значениях степени дальнего порядка. Этот вывод, полученный нами в ПКП, принципиально отличается от результатов, полученных методом кинетического уравнения, когда при некоторых условиях вакансионный вклад в сопротивление может стать отрицательным [3].

На рисунке 1а изображены концентрационные зависимости электросопротивления упорядоченного сплава с вакансиями (пунктирная линия) и без вакансий (сплошная линия) при максимальном порядке, полученные в [3]. Видно, что для сплава с вакансиями существует концентрационный интервал, в котором вакансионный вклад в сопротивление отрицателен. Наши результаты для упорядоченных сплавов при максимальном порядке (7) – (9) приведены на рисунке 1б.

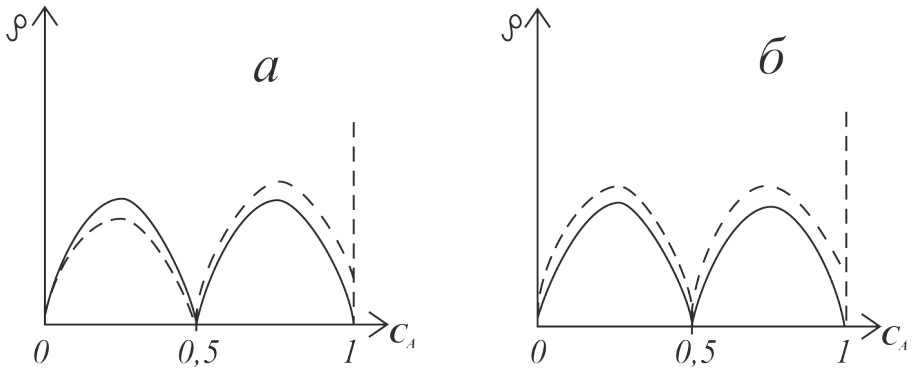

Рисунок 1 - Концентрационные зависимости остаточного электросопротивления упорядоченного сплава с вакансиями (*пунктирная линия*) и без вакансий (*сплошная линия*) при максимальном порядке

DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.162.1

Примечание: эффект влияния вакансий на рисунке преувеличен

Остаточное электросопротивление неупорядоченных сплавов с вакансиями

В неупорядоченном состоянии подрешетки эквивалентны, поэтому эффективная среда, с помощью которой описывается исследуемая система, задается в одноузельном ПКП одним когерентным потенциалом $\sigma(z)$. Для бинарного неупорядоченного сплава с вакансиями $\sigma(z)$ находится из уравнения

$$p_A \frac{\varepsilon_A - \sigma}{1-(\varepsilon_A-\sigma)F} + p_B \frac{\varepsilon_B - \sigma}{1-(\varepsilon_B-\sigma)F} - \frac{p_V}{F} = 0, \tag{10}$$

которое получается из системы (4) в случае $\sigma^{(1)} = \sigma^{(2)} = \sigma, F_1 = F_2 = F.$ В этом уравнении p_a есть вероятность того, что узел решетки сплава занят либо атомом А или В, либо вакансией. Функция $\mathrm{F}(z)$ определяется соотношениями

$$F(z) = \langle \vec{n} | \tilde{G}(z) | \vec{n} \rangle = F_0(z-\sigma), \tag{11}$$

$$F_0(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D_0(E)dE}{z-E} \tag{12}$$

где $\tilde{G}(z)$ резольвента Грина для эффективного гамильтониана, $\langle \vec{n}|$ и $|\vec{n}\rangle$ функции Ваннье для узла $\vec{n}$, $D_0(E)$ плотность электронных состояний, соответствующая трансляционно-инвариантному гамильтониану H_0. Далее функция $D_0(E)$ аппроксимируется полуэллиптической кривой, полуширина которой равна единице [6], [7]. В этом случае

$$F_0(z) = 2\left(z - \sqrt{z^2 - 1}\right). \tag{13}$$

Тогда

$$\sigma(z) = z - (F(z))^{-1} - \tfrac{1}{4}F(z) \tag{14}$$

Исключая $\sigma(z)$ из уравнения (10) с помощью (14), запишем (10) в эквивалентном виде

$$F(z) = p_A\left(z - \varepsilon_A - \tfrac{1}{4}F(z)\right)^{-1} + p_B\left(z - \varepsilon_B - \tfrac{1}{4}F(z)\right)^{-1}. \tag{15}$$

Последнее преобразуется в уравнение третьей степени относительно функции $\mathrm{F}(z)$:

$$\mathrm{F}^3(\mathrm{z}) - 4F^2(\mathrm{z})\,(d_A + d_B) + 16F(\mathrm{z})\left(d_A d_B + \tfrac{1}{4}\,(\mathrm{p_A} + \mathrm{p_B})\right) - 16\,(\mathrm{p_A} d_B + \mathrm{p_B} d_A) = 0 \tag{16}$$

Здесь $d_\alpha = z - \varepsilon_\alpha, z = E + i0$.

Определим вероятности p_a следующим образом [1]. Пусть в сплаве имеется N_A атомов сорта A , N_B атомов сорта B и n вакансий $(N_A + N_B = N)$. Назовем $c_A = \frac{N_A}{N}, c_B = \frac{N_B}{N}, x = \frac{n}{N}$ соответственно концентрациями атомов сорта *A, B* и вакансий. Тогда

$$\mathrm{p_A} = c_A(1+x)^{-1}, \mathrm{p_B} = c_B(1+x)^{-1}, \mathrm{p_V} = x(1+x)^{-1} \tag{17}$$

Через решения уравнения (16) плотность электронных состояний на узел $\mathrm{D}(E)$ выражается соотношением

$$D(E) = -\tfrac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,F(E + i0), \tag{18}$$

а электропроводность $\lambda\left(\rho = \lambda^{-1}, \rho\right.$ – электросопротивление $\left.\right)$ описывается формулой

$$\lambda\,(\varepsilon_F) = \tfrac{e^2 h v_m^2}{3\pi\Omega}(\mathrm{ImF}(z))^2\left(\tfrac{1}{2} + \left(1 - \tfrac{1}{4}|F(z)|^2\right)^{-1}\right), z = \varepsilon_F + i0, \tag{19}$$

в которой энергия Ферми $\mathcal{E}_F$ в сплаве с вакансиями определяется из уравнения

$$\mathrm{p_A} n_A + \mathrm{p_B} n_B = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} D(E)dE. \tag{20}$$

Здесь e – заряд электрона, Ω – объем, приходящийся на один атом, v_m – максимальная скорость в полосе, n_a – число валентных электронов металла a .

С помощью соотношений (16) – (20) нами было проведено численное исследование влияния вакансий на плотность электронных состояний и остаточное электросопротивление сплава при следующих значениях параметров: $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = 0,125$ и $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = 0,25; x = 0,001$ и $x = 0,01; n_A = n_B = 0,2, n_A = n_B = 0,5, n_A = n_B = 0,8, n_A = 0,1$ и $n_B = 0,3.$

Результаты расчетов позволяют сделать вывод, что при всех рассмотренных значениях параметров появление вакансий приводит к уменьшению плотности электронных состояний и увеличению остаточного электросопротивления сплава, причем эти эффекты тем сильнее, чем выше концентрация вакансий. Для ряда значений параметров результаты расчетов представлены на рисунке 2.

Для нахождения аналитического решения уравнения (10) используем наличие в нем малого параметра x . Рассмотрим случай слабого рассеяния в системе *A-B* атомов, при этом рассеяние на вакансиях мы не считаем малым. Тогда с точностью до линейных по x и квадратичных по δ членов получим для плотности электронных состояний неупорядоченного сплава с вакансиями

$$D(E) = \tfrac{2}{\pi}\left(\sqrt{1 - (E - \bar{\varepsilon})^2} - \tfrac{x}{2\sqrt{1 - (E - \bar{\varepsilon})^2}}\right) \tag{21}$$

где $\bar{\varepsilon} = c_A\varepsilon_A + c_B\varepsilon_B.$ Формула (21) позволяет сделать вывод, что появление вакансий приводит к качественно одинаковым изменениям плотности электронных состояний на узел в случаях слабого и промежуточного рассеяния: при появлении вакансий $\mathrm{D}(E)$ уменьшается тем больше, чем выше концентрация вакансий.

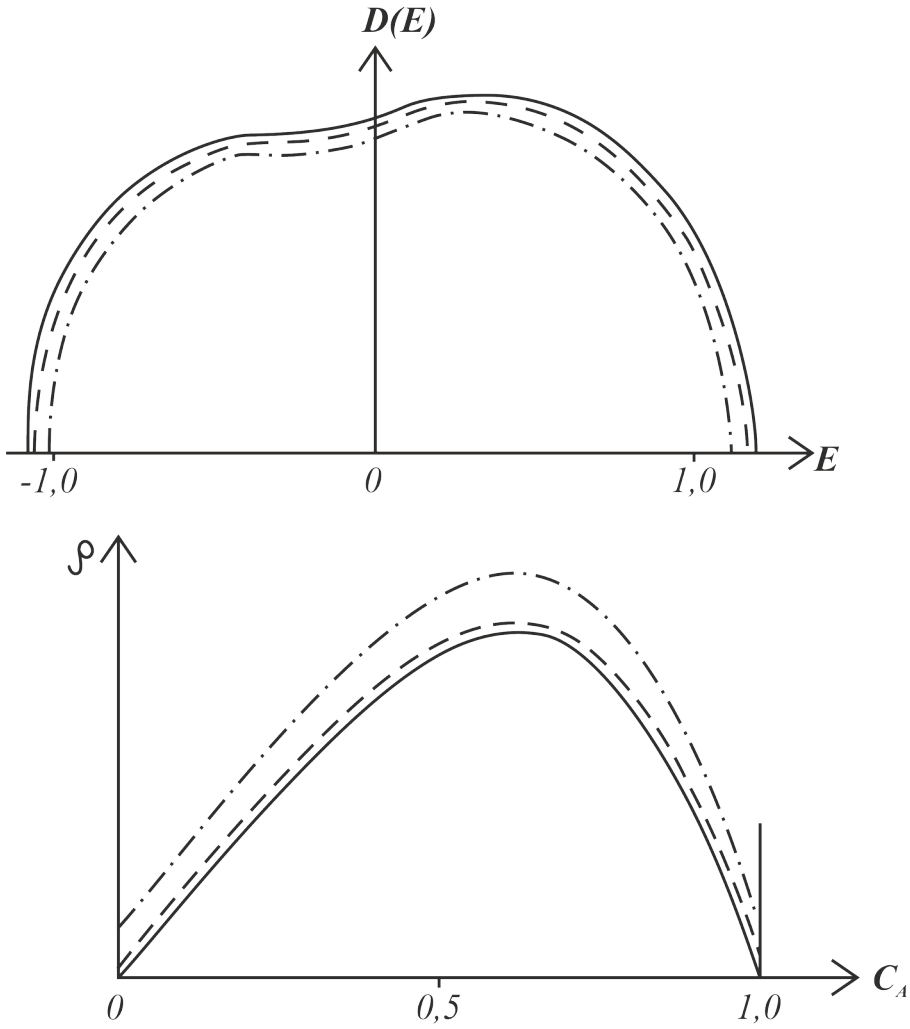

Рисунок 2 - Влияние вакансий на плотность электронных состояний D(E) (в этом случае выбраны значения параметров δ = 0,5 и c_A = 0,6) и остаточное электросопротивление *p* неупорядоченных сплавов (здесь δ = 0, 25 и n_A = n_B = 0,2)

DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.162.2

Примечание: эффект влияния вакансий на D(E) и p на рисунке преувеличен; сплошная линия -x=0, пунктирная линия - x=0,001 штрих-пунктирная линия -x=0,01 (x – концентрация вакансий)

В этом же приближении остаточное электросопротивление неупорядоченного сплава с вакансиями (в этом случае энергия Ферми сплава $\varepsilon^0{}_F$ не зависит от концентрации вакансий) запишется в следующем виде:

$$\rho = \rho_{al} + \rho_V, \tag{22}$$

где ρ_{al} – остаточное сопротивление неупорядоченного сплава без вакансий, ρ_V – вакансионный вклад в сопротивление

$$\rho_{al} = \rho^* \cdot c_A c_B \delta^2, \rho_V = \rho^* \cdot \frac{x}{4} \tag{23}$$

В этих формулах

$$\rho^* = \frac{12\Omega}{\pi e^2 h v_{m^2} \left(D^o\left(\varepsilon^0\right)\right)^2}, D^O(E) = \frac{2}{\pi}\sqrt{1-(E-\bar{\varepsilon})^2} \tag{24}$$

Из соотношений (23) и (24) видно, что зависимость $\frac{\rho_V}{x}$ от c_A определяется величиной $D^o\left(\varepsilon^0{}_F\right)$. В изоэлектронных сплавах $D^o\left(\varepsilon^0{}_F\right)$ не зависит от состава, и $\frac{\rho_V}{x}$ сохраняет постоянное значение во всем интервале концентраций c_A.

Соотношения (23) представляют собой частный случай выражений (8) и (9), когда $\eta = 0, c_{V1} = c_{V2} = x$. Как видно из формул (8), (9), (23), в ПКП в пределе слабого рассеяния в системе *A-B* атомов вакансии всегда увеличивают сопротивление как упорядочивающихся, так и неупорядоченных сплавов. Этим наши результаты, основанные на использовании ПКП, отличаются от полученных методом кинетического уравнения выводов, допускающих наличие

отрицательного вакансионного вклада. Для сравнения на рисунке 3 приведены графики концентрационной зависимости остаточного сопротивления неупорядоченных сплавов с вакансиями (пунктирная линия) и без вакансий (сплошная линия). Согласно [2], [3], [4], для неупорядоченных сплавов возможны два случая: вакансии приводят к увеличению остаточного сопротивления сплава при всех составах (см. рис. 3а); наличие вакансий обеспечивает уменьшение сопротивления в средней части концентрационного интервала (см. рис. 3б). Наши результаты показаны на рисунке 3а.

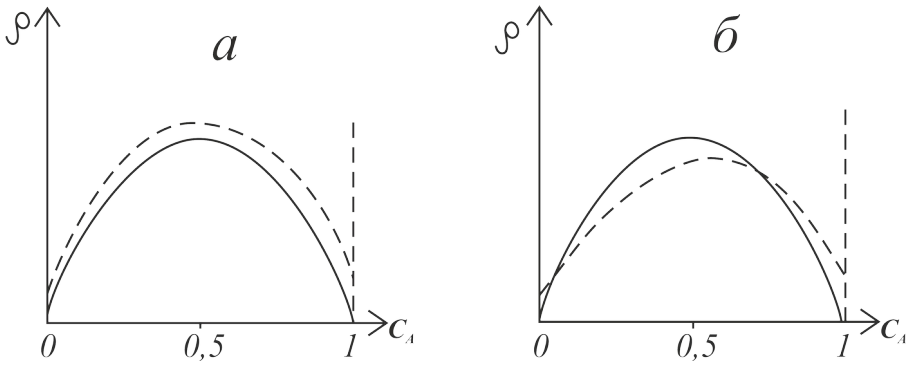

Рисунок 3 - Концентрационные зависимости остаточного электросопротивления *ρ* неупорядоченного сплава с вакансиями (*пунктирная линия*) и без вакансий (*сплошная линия*)
DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.162.3

Примечание: эффект влияния вакансий на рисунке преувеличен

Влияние вакансий на электросопротивление чистых металлов

Перейдем к изучению свойств металлов с вакансиями. Если для упорядочивающихся и неупорядоченных сплавов возможен либо численный расчет, либо разложение по малым параметрам, то для чистых металлов с вакансиями доступно точное решение. Интересуясь удельными характеристиками металла, будем рассматривать основную область кристалла, содержащую N узлов, n из которых вакантны. Тогда $x = \frac{n}{N}$ есть концентрация вакансий, и когерентный потенциал металла с вакансиями $\sigma(\mathrm{z})$ находится из уравнения

$$(1-x)\frac{\varepsilon-\sigma(\mathrm{z})}{1-(\varepsilon-\sigma(\mathrm{z}))\mathrm{F}(\mathrm{z})} - \frac{x}{\mathrm{F}(\mathrm{z})} = 0, \tag{25}$$

где ε – атомный уровень рассматриваемого металла. Данное уравнение является частным случаем уравнений (4) и (10) при $\eta = 0, c_A = 1, c_B = 0$. Уравнение (25) дает

$$\sigma(\mathrm{z}) = \varepsilon - \frac{x}{\mathrm{F}(\mathrm{z})} \tag{26}$$

С учетом аппроксимации плотности электронных состояний металла полуэллиптической кривой с полушириной равной единице и соотношения (14) можно решить (26) относительно $\mathrm{F}(z)$. Получим

$$\mathrm{F}(\mathrm{z}) = 2\left(z - \varepsilon - \sqrt{(z-\varepsilon)^2 - (1-x)}\right) \tag{27}$$

В дальнейшем для удобства положим $\varepsilon = 0$. Тогда плотность электронных состояний на узел в металле с вакансиями будет равна

$$D(E) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,F(E+i0) = \frac{2}{\pi}\sqrt{1-x-E^2} \tag{28}$$

Можно показать, что энергия Ферми металла с вакансиями ε_F задается выражением

$$\varepsilon_F = \varepsilon_F{}^0\sqrt{1-x} \tag{29}$$

где $\varepsilon_F{}^0$ – энергия Ферми металла без вакансий.

Подставляя (27) – (29) в (19), запишем для остаточного электросопротивления металла с вакансиями p_V

$$\rho_V = \rho^* \cdot \frac{x}{2(1-x)(2+x)}. \tag{30}$$

Здесь ρ^* определяется соотношениями (24), в которых нужно положить $\bar{\varepsilon} = 0.$ Отметим, что формула (30) описывает зависимость электросопротивления металла от концентрации вакансий точно. Поскольку $x \ll 1,$ сохраним в (30) только линейный по *x* вклад

$$\rho_V = \rho^* \cdot \frac{x}{4}. \tag{31}$$

Формула (31) для ρ_V содержит в коэффициенте ρ^* ряд параметров $\left(v_m, D^0\left(\varepsilon_F^0\right)\right)$, которые трудно оценить теоретически. Однако, через эти же параметры выражается фононная часть электросопротивления металла ρ_{ph} [15]

$$\rho_{ph} = \rho^* \alpha \frac{T}{T_{\text{пл}}}. \quad (32)$$

Здесь $T_{\text{пл}}$ – температура плавления металла; коэффициент a определяется типом токонесущих электронных состояний: для *s*-состояний $\alpha \approx 0,02,$ для *d*-состояний $\alpha \approx 0,075$ [15]. Это позволяет записать ρ_V в виде

$$\overline{\rho_V} = \frac{\rho_V}{x} = \frac{1}{4} \cdot \frac{\rho_{ph}}{\alpha} \cdot \frac{T_{\text{пл}}}{T}. \quad (33)$$

Используя экспериментальные значения ρ_{ph} и $T_{\text{пл}}$ – для ряда металлов [16], по формуле (33) можно вычислить соответствующие величины $\overline{\rho_V}$. Результаты такого расчета приведены в Таблице 1, где указаны также экспериментальные данные о влиянии вакансий на сопротивление. При численных оценках $\overline{\rho_V}$ считалось, что во всех перечисленных металлах ток переносится s-электронами.

Таблица 1 - Значения сопротивления для разных металлов

DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.162.4

Металл	, мком см/ат.% вакансий	
	Расч.	Эксп.
Cu	0,98	1,2±0,6 [17]
Ag	0,84	1,3±0,7 [17]
Au	1,25	1,5±0,3 [17]
Pb	0,25	0,19±0,02 [18]
Al	1,08	2,2±0,7 [19]

Как видно из Таблицы 1, рассчитанные значения сопротивления, обусловленного рассеянием на вакансиях, находятся в неплохом согласии с экспериментальными данными. Результаты измерений вакансионного вклада в сопротивление металлов имеют довольно большой разброс, что, возможно, связано с отличиями в оценке числа вакансий и условиях закалки в различных экспериментах.

Имеющееся согласие экспериментальных и расчетных значений позволяет по величине полного прироста сопротивления закаленного металла и вычисленному по формуле (33) значению сопротивления на один атомный процент вакансий оценить концентрацию вакансий в металле. Это представляет определенный практический интерес ввиду сравнительной простаты данного метода в сравнении с другими возможными способами определения концентрации вакансий в металлах.

Заключение

За счет вакансий для неупорядоченных и частично упорядоченных сплавов происходит увеличение остаточного электросопротивления при любых составах и значениях параметра дальнего порядка.

В неупорядоченных изоэлектронных сплавах вакансионный вклад в сопротивление, приходящийся на один атомный процент вакансий, не зависит от состава сплава.

Численные оценки обусловленного одним атомным процентом вакансий вклада в электросопротивление чистых металлов находятся в хорошем согласии с экспериментальными значениями для целого ряда металлов (Cu, Ag, Au, Pb, Al), что позволяет весьма надежно оценивать концентрацию вакансий в металле по величине полного прироста сопротивления закаленного металла.

Финансирование

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Сплавы») Г.р.№ АААА-А19-119070890020-3.

Funding

The work was performed within the framework of the state assignment of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (topic "Alloys"), state number AAAAA19-119070890020-3.

Конфликт интересов

Не указан.

Conflict of Interest

None declared.

Рецензия

Все статьи проходят рецензирование. Но рецензент или автор статьи предпочли не публиковать рецензию к этой статье в открытом доступе. Рецензия может быть предоставлена компетентным органам по запросу.

Review

All articles are peer-reviewed. But the reviewer or the author of the article chose not to publish a review of this article in the public domain. The review can be provided to the competent authorities upon request.

Список литературы / References

1. Смирнов А. А. Молекулярно-кинетическая теория металлов / А. А. Смирнов. — Москва : Наука, 1966. — 488 с.

2. Смирнов А. А. Теория электросопротивления сплавов / А. А. Смирнов. — Киев : Изд-во АН УССР, 1960. — 148 с.

3. Матысина З. А. Влияние дырок на электросопротивление упорядочивающихся сплавов / З. А. Матысина, Э. А. Матысина // Известия вузов. Физика. — 1970. — № 9. — С. 81–87.

4. Матысина З. А. Влияние вакансий на остаточное электросопротивление упорядочивающихся сплавов с гранецентрированной кубической решеткой / З. А. Матысина, Э. А. Матысина // Известия вузов. Физика. — 1971. — № 10. — С. 84–88.

5. Faulkner J. S. Electronic states of substoichiometric compounds and application to palladium hydride / J. S. Faulkner // Physical Review.B. — 1976. — Vol. 13. — № 6. — P. 2391–2397.

6. Velicky B. Single site approximations in the electronic theory of simple binary alloys / B. Velicky, S. Kirkpatrick, H. Ehrenreich // Physical Review. — 1968. — Vol. 175. — № 3. — P. 747–766.

7. Borodachev S. M. Residual resistivity of binary ordering alloys (coherent potential approximation) / S. M. Borodachev, S. I. Masharov, V. A. Volkov // Physics of metals and metallography. — 1976. — Vol. 42. — P. 19–25.

8. Волков В. А. Электросопротивление тройных упорядочивающихся ферромагнитных сплавов / В. А. Волков, А. А. Куранов, С. И. Машаров [и др.] // Физика металлов и металловедение. — 1979. — Т. 47. — № 3. — С. 516–523.

9. Волков В. А. Электросопротивление тройных упорядочивающихся сплавов замещения / В. А. Волков, Л. П. Зеленин, Н. А. Лобашева [и др.] // Физика металлов и металловедение. — 1989. — Т. 68. — № 3. — С. 506–511.

10. Borodin K. I. The equilibrium concentration of vacancies in solid interstitial solutions with two types of filled internodes / K. I. Borodin, V. A. Volkov // AIP Conference Proceedings. — 2020. — Vol. 2313. — P. 030041.

11. Volkov V. A. Equilibrium concentration of divacancies in cubic interstitial solid solutions / V. A. Volkov, G. S. Masharov, S. I. Masharov // The physics of metals and metallography. — 2006. — Vol. 102. — P. 241–243.

12. Volkov V. A. The effect of thermal redistribution of various interstitial impurities on equilibrium vacancy concentration in BCC substitutional – interstitial alloy / V. A. Volkov, S. I. Masharov // Russian Physics Journal. — 2007. — Vol. 50. — № 4. — P. 400–404.

13. Volkov V. A. Concentration of vacancies and self-diffusion of nodal atoms in binaru interstitial solutions / V. A. Volkov // Russian Physics Journal. — 2014. — Vol. 57. — № 4. — P. 561–563.

14. Kudrnovsky J. Electrical conductivity of electrons in a model binary disordered alloy with long range order // J. Kudrnovsky, B. Velicky // Czechoslovak Journal of Physics. — 1977. — Vol. B27. — № 1. — P. 71–87.

15. Chen A. B. Temperature dependence of the electron density of states and dc electrical resistivity of disordered binary alloys / A. B. Chen, G. Weisz, A. Sher // Physical Review B. — 1972. — Vol. B5. — № 8. — P. 2897–2924.

16. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела / Киттель Ч. — Москва : Наука, 1978. — 792 с.

17. Simmons R. O. Measurement of equilibrium concentrations of vacancies in copper / R. O. Simmons // Physical Review. — 1963. — Vol. 129. — № 4. — P. 1533–1544.

18. Leadletter A. J. Energy of formation of lattice vacancies in lead from equilibrium resistivity and quenching studies / A.J. Leadletter // Philosophical Magazine. — 1966. — Vol. 13. — № 122. — P. 371–377.

Список литературы на английском языке / References in English

1. Smirnov A. A. Molekuljarno-kineticheskaja teorija metallov [Molecular-kinetic theory of metals] / A. A. Smirnov. — Moscow : Nauka, 1966. — 488 p. [in Russian]

2. Smirnov A. A. Teoriya elektrosoprotivleniya splavov [Theory of electrical resistance of alloys] / A. A. Smirnov. — Kyiv : Publishing House of the Academy of Sciences of the Ukrainian SSR, 1960. — 148 p. [in Russian]

3. Matysina Z. A. Vlijanie dyrok na jelektrosoprotivlenie uporjadochivajushhihsja splavov [The effect of holes on the electrical resistance of ordered alloys] / Z. A. Matysina, E. A. Matysina // Izvestija vuzov. Fizika [News of universities. Physics]. — 1970. — № 9. — P. 81–87. [in Russian]

4. Matysina Z. A. Vlijanie vakansij na ostatochnoe jelektrosoprotivlenie uporjadochivajushhihsja splavov s granecentrirovannoj kubicheskoj reshetkoj [The effect of vacancies on the residual electrical resistance of ordered alloys with a face-centered cubic lattice] / Z. A. Matysina, E. A. Matysina // Izvestija vuzov. Fizika [News of universities. Physics]. — 1971. — № 10. — P. 84–88. [in Russian]

5. Faulkner J. S. Electronic states of substoichiometric compounds and application to palladium hydride / J. S. Faulkner // Physical Review.B. — 1976. — Vol. 13. — № 6. — P. 2391–2397.

6. Velicky B. Single site approximations in the electronic theory of simple binary alloys / B. Velicky, S. Kirkpatrick, H. Ehrenreich // Physical Review. — 1968. — Vol. 175. — № 3. — P. 747–766.

7. Borodachev S. M. Residual resistivity of binary ordering alloys (coherent potential approximation) / S. M. Borodachev, S. I. Masharov, V. A. Volkov // Physics of metals and metallography. — 1976. — Vol. 42. — P. 19–25.

8. Volkov V. A. Jelektrosoprotivlenie trojnyh uporjadochivajushhihsja ferromagnitnyh splavov [Electrical resistance of triple ordered ferromagnetic alloys] / V. A. Volkov, A. A. Kurganov, S. I. Masharov [et al.] // Fizika metallov i metallovedenie [Physics of Metals and Metallovedenie]. — 1979. — Vol. 47. — № 3. — P. 516–523. [in Russian]

9. Volkov V. A. Jelektrosoprotivlenie trojnyh uporjadochivajushhihsja splavov zameshhenija [Electrical resistance of triple ordered substitution alloys] / V. A. Volkov, L. P. Zelenin, N. A. Lobasheva [et al.] // Fizika metallov i metallovedenie [Physics of Metals and Metal Studies]. — 1989. — Vol. 68. — № 3. — P. 506–511. [in Russian]

10. Borodin K. I. The equilibrium concentration of vacancies in solid interstitial solutions with two types of filled internodes / K. I. Borodin, V. A. Volkov // AIP Conference Proceedings. — 2020. — Vol. 2313. — P. 030041.

11. Volkov V. A. Equilibrium concentration of divacancies in cubic interstitial solid solutions / V. A. Volkov, G. S. Masharov, S. I. Masharov // The physics of metals and metallography. — 2006. — Vol. 102. — P. 241–243.

12. Volkov V. A. The effect of thermal redistribution of various interstitial impurities on equilibrium vacancy concentration in BCC substitutional – interstitial alloy / V. A. Volkov, S. I. Masharov // Russian Physics Journal. — 2007. — Vol. 50. — № 4. — P. 400–404.

13. Volkov V. A. Concentration of vacancies and self-diffusion of nodal atoms in binaru interstitial solutions / V. A. Volkov // Russian Physics Journal. — 2014. — Vol. 57. — № 4. — P. 561–563.

14. Kudrnovsky J. Electrical conductivity of electrons in a model binary disordered alloy with long range order // J. Kudrnovsky, B. Velicky // Czechoslovak Journal of Physics. — 1977. — Vol. B27. — № 1. — P. 71–87.

15. Chen A. B. Temperature dependence of the electron density of states and dc electrical resistivity of disordered binary alloys / A. B. Chen, G. Weisz, A. Sher // Physical Review B. — 1972. — Vol. B5. — № 8. — P. 2897–2924.

16. Kittel Ch. Vvedenie v fiziku tverdogo tela [Introduction to Solid State Physics] / Kittel Ch. — Moscow : Nauka, 1978. — 792 p. [in Russian]

17. Simmons R. O. Measurement of equilibrium concentrations of vacancies in copper / R. O. Simmons // Physical Review. — 1963. — Vol. 129. — № 4. — P. 1533–1544.

18. Leadletter A. J. Energy of formation of lattice vacancies in lead from equilibrium resistivity and quenching studies / A.J. Leadletter // Philosophical Magazine. — 1966. — Vol. 13. — № 122. — P. 371–377.