

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 669.24.234:538.632

АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ НЕРНСТА — ЭТТИНГСГАУЗЕНА В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВАХ

А. А. Абдурахманов, Р. П. Васильева, А. В. Ведяев, А. Б. Грановский, Е. И. Кондорский, С. И. Стадник

(кафедра магнетизма)

В ферромагнитных или парамагнитных металлах и сплавах при наличии градиента температуры ∇T и магнитного поля \mathbf{H} возникает электрическое поле \mathbf{E} , выражение для которого имеет вид

$$\mathbf{E} = S \nabla T - Q_0 [\mathbf{H} \times \nabla T] - Q_s [\mathbf{M} \times \nabla T], \quad (1)$$

где S — термоэдс, Q_0 и Q_s — константы нормального и аномального эффектов Нернста—Эттингсгаузена (АЭНЭ), \mathbf{M} — намагниченность.

АЭНЭ является термоэлектрическим аналогом аномального эффекта Холла (АЭХ), и оба этих явления обусловлены влиянием спин-орбитального взаимодействия (СОВ) на рассеяние носителей тока. Теория АЭНЭ была построена в работе [1], где в случае рассеяния электронов на примесях и фононах получено выражение

$$Q_s = -(L + N\rho)T \quad (2)$$

(L и N — коэффициенты, не зависящие от температуры), хорошо согласующееся с экспериментальными данными [2]. В последующих работах [3–6] либо рассматривались другие механизмы рассеяния, либо уточнялись выражения для коэффициентов L и N в (2) в случаях неупругого рассеяния или концентрированных сплавов.

В работе [3] получено выражение, связывающее константу АЭНЭ Q_s с константой АЭХ R_s в случае упругого рассеяния:

$$Q_s = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} T \left(\frac{d}{dE} \frac{R_s}{\rho} \right)_{E_F}, \quad (3)$$

которое Кэмпбеллом [7] представлено в эквивалентном виде:

$$Q_s = Q_{s_1} + Q_{s_2}; \quad Q_{s_1} = -SR_s/\rho; \quad Q_{s_2} = -\eta T\rho, \quad (4)$$

где

$$\eta = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \left(\frac{\partial}{\partial E} \frac{R_s}{\rho^2} \right)_{E_F}. \quad (5)$$

Кэмпбелл [7] показал, что при соответствующем выборе феноменологического параметра η в (5) удастся качественно описать температурную зависимость $Q_s(T)$ чистых металлов Fe, Ni, Co.

В данной работе на основе выражения (5) для Q_s и теории АЭХ неупорядоченных сплавов [8, 9, 10] обсуждаются температурная и концентрационная зависимости константы АЭНЭ сплавов переходных металлов при слабом и сильном примесном рассеянии.

Постановка задачи. Будем считать, что ответственными за АЭНЭ и АЭХ сплавов переходных $3d$ -металлов являются поляризованные по

спину d -подобные электроны, асимметричное рассеяние которых возникает под действием собственного СОВ [8–10]. Если электрическое поле, создающее ток, направлено по оси a , слабое магнитное поле ($H \ll M_c$) по оси c , то

$$R_s = R_s^\uparrow + R_s^\downarrow = -(\sigma_{\alpha\beta}^\uparrow + \sigma_{\alpha\beta}^\downarrow) M_c^{-1} \rho^2, \quad (6)$$

где $\sigma_{\alpha\beta}^{\uparrow\downarrow}$ — аномальная холловская электропроводность зоны с индексом спина вдоль (против) намагниченности сплава M_c , ρ — полное сопротивление сплава. Выражения для $\sigma_{\alpha\beta}^{\uparrow\downarrow}$ бинарного сплава A_xB_y ($y=1-x$) при произвольной величине потенциала рассеяния, связанного с хаотическим расположением ионов компонент сплава по узлам решетчатых («примесный» потенциал), и слабом электрон-фононном взаимодействии получены в работах [8–10]. Для расчета Q_s , согласно выражениям (5), (6), приведем некоторые результаты работы [10]. В этой работе было показано, что при полуэллиптической форме плотности состояний $N_0(E)$

$$N_0(E) = \frac{2}{\pi\omega^2} (\omega^2 - E^2)^{1/2}; \quad |E| \leq \omega; \quad N_0(E) = 0; \quad |E| > \omega, \quad (7)$$

где ω — полуширина зоны, и при $T \geq T_D$, где T_D — температура Дебая сплава,

$$\sigma_{\alpha\beta}^n = D_n' \lambda_{so} \frac{M_c^n}{M_0^n} [N_n(E)]^7 \frac{B_n^0(E) + B_n^\alpha(E) + B_n^{\alpha^2}(E)}{(\Delta_n(E))^2}, \quad (8)$$

где λ_{so} — статистически усредненная константа СОВ сплава, индекс n соответствует вкладу в $\sigma_{\alpha\beta}$ рассматриваемой n -й зоны; M_c^n (M_0^n) — вклад в намагниченность рассматриваемой зоны при $T=0$, $\Delta_n(E)$ — обратное время жизни электронов; B_n^0 , B_n^α , $B_n^{\alpha^2}$ — коэффициенты, определяемые рассеянием на «примесном» потенциале, интерференционными процессами рассеяния и рассеянием на фонах соответственно; D_n' — константа, знак которой зависит от направления поляризации данной зоны.

Конкретные выражения для B_n^0 , B_n^α , $B_n^{\alpha^2}$, Δ зависят от величины потенциала «примесного» рассеяния $\delta = (\epsilon^A - \epsilon^B)/\omega$, где ϵ^A и ϵ^B — потенциалы компонент сплава. При $|\delta| \ll 1$

$$B_1^0 = xy(y-x)\delta^3; \quad B_1^\alpha = 3xy\delta(g^A - g^B) \frac{T}{T_D};$$

$$B_1^{\alpha^2} = 4[3\bar{g}^2 - 2\bar{g}^2] \left(\frac{T}{T_D}\right)^2 \frac{(E - \bar{\epsilon})}{\omega} + \bar{g}_{II} \left(\frac{T}{T_D}\right)^2 = \bar{g}_I \left(\frac{T}{T_D}\right)^2 \frac{(E - \bar{\epsilon})}{\omega} + \bar{g}_{II} \left(\frac{T}{T_D}\right)^2; \quad (9)$$

$$\Delta_1(E) = \left(xy\delta^2 + \bar{g} \frac{T}{T_D}\right) \pi N(E), \quad (10)$$

где g^A , g^B — константы электрон-фононного взаимодействия, $\bar{\epsilon} = x\epsilon^A + y\epsilon^B$. Второй член в выражении для $B_1^{\alpha^2}$ описывает вклад двух-фононных процессов рассеяния, не учтенных в работе [10]. Так как этот вклад возникает в том же порядке, что и интерференционный, то нетрудно показать на основе работ [11, 12], что он не зависит от энергетической переменной. В случае сильного рассеяния ($|\delta| \gg 1$), когда

уровень Ферми находится в окрестности подзоны компоненты А (см. [9]),

$$B_2^{(0)}(E) = -\frac{y}{4x} \delta \left(1 + \frac{3y}{(\pi N(E))^2 \omega^2} \right); B_2^z(E) =$$

$$= \frac{y \delta g^A}{x^2} \left[1 + \frac{8(E - \varepsilon^A)^2}{\omega^4 (\pi N(E))^2} \right] \frac{T}{T_D};$$

$$B_2^{\alpha z}(E) = 4 \left(\frac{g^A}{x} \right)^2 \frac{(E - \varepsilon^A)}{\omega} \left(\frac{T}{T_D} \right)^2 + \frac{g_{II}^A}{x} \left(\frac{T}{T_D} \right)^2; \quad (11)$$

$$\Delta_2(E) = \left(\frac{y}{4x} + \frac{g^A}{x} \frac{T}{T_D} \right) \pi N(E). \quad (12)$$

При положении уровня Ферми в окрестности ε^B в выражениях (11), (12) следует заменить $A \rightarrow B$, $x \rightleftharpoons y$. Отметим, что параметры δ , $\varepsilon^{A,B}$, $g^{A,B}$, $N(E)$ в (9)–(12) зависят от индекса зоны.

Подставляя (9)–(12) в (8), а затем в (6), можно получить

$$R_s = a + bT/T_D + c(T/T_D)^2, \quad (13)$$

где коэффициенты a , b , c для сплава в низшем приближении не зависят от температуры [10], причем величина этих параметров определяется суммой вкладов от зон с противоположной поляризацией спинов. Выражение (13) хорошо описывает экспериментальные данные [10], что дает основание использовать соотношения, аналогичные (9)–(12), для расчета Q_s .

Расчет константы Q_s .

1. Чистый металл. В случае чистого металла, как следует из (8)–(10), $B^0 = B^z = 0$, $\Delta \sim T/T_D$, и тогда из (5)–(6) получаем

$$\eta = -\frac{Q_s}{T\rho} = \eta^\uparrow + \eta^\downarrow, \quad (14)$$

$$\eta^{\uparrow\downarrow} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \left\{ \frac{R_s^{\uparrow\downarrow}}{\rho^2} \left[\frac{5}{N_{\uparrow\downarrow}(E_F)} \left(\frac{dN_{\uparrow\downarrow}(E)}{dE} \right)_{E_F} + \frac{1}{(E_F - \bar{\varepsilon}_{\uparrow\downarrow}) + \left(\frac{\bar{g}_{II}}{g_I} \right) \omega} \right] \right\}. \quad (15)$$

2. Слабое «примесное» рассеяние. При $|\delta| \ll 1$ для сплава, у которого зависимость R_s от температуры определяется соотношением (13), из (8)–(10) следует

$$\eta = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \left\{ \frac{R_s^{\uparrow\downarrow}}{\rho^2} \frac{5}{N_{\uparrow\downarrow}(E)} \left(\frac{dN(E)}{dE} \right)_{E_F} + \frac{c^{\uparrow\downarrow} \left(\frac{T}{T_D} \right)^2}{\rho^2 \left[(E_F - \bar{\varepsilon}_{\uparrow\downarrow}) + \left(\frac{\bar{g}_{II}}{g_I} \right) \omega \right]} \right\}. \quad (16)$$

3. Сильное «примесное» рассеяние. Если уровень Ферми находится в окрестности ε^A , то из (5), (11)–(13) нетрудно получить следующее выражение:

$$\eta^{\uparrow\downarrow} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \frac{5}{N^{\uparrow\downarrow}(E_F)} \left(\frac{dN_{\uparrow\downarrow}(E)}{dE} \right)_{E_F} \frac{a_{\uparrow\downarrow}' + b_{\uparrow\downarrow}'(T/T_D) + c_{\uparrow\downarrow}'(T/T_D)^2}{\rho^2}, \quad (17)$$

где параметры a' , b' , c' не совпадают с параметрами a , b и c , характеризующими зависимость $R_s(T)$:

$$a' = a \left[1 - \frac{6}{5} y \delta (\pi N(E_F) \omega)^{-2} \left(1 + \frac{3y}{(\pi N(E_F) \omega)^2} \right)^{-1} \right], \quad (18)$$

$$b' = b \left[1 + \frac{8}{5} \frac{1 - 2(E_F - \epsilon^A) \frac{1}{N(E_F)} \left(\frac{dN(E)}{dE} \right)_{E_F}}{(\pi N(E_F) \omega)^2 \left[1 + \frac{8(E - \epsilon^A)}{\omega^2 \pi^2 N(E_F)} \right] \frac{1}{N(E_F)} \left(\frac{dN(E)}{dE} \right)_{E_F}} \right], \quad (19)$$

$$c' = c \left\{ 1 + \left[\frac{5}{N(E_F)} \left(\frac{dN}{dE} \right)_{E_F} \right]^{-1} \left[(E_F - \epsilon^A) + \frac{\bar{g}_{II}}{g_I} \omega \right]^{-1} \right\}. \quad (20)$$

При уровне Ферми в окрестности ϵ^B в выражениях (18)–(20) следует заменить $A \rightarrow B$, $x \rightleftharpoons y$.

Обсуждение результатов. Предположим сначала, что носителями АЭХ и АЭНЭ являются носители одной зоны. Так как по оценкам [12, 13] вклад двухфононных процессов рассеяния в R_s не превышает вклада однофононных, получаем из (15) и (16) для металла или сплава при слабом рассеянии

$$\eta = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \frac{5R_s}{\rho^2} \left[\frac{1}{N(E_F)} \left(\frac{dN(E)}{dE} \right)_{E_F} + \frac{1}{5(E_F - \bar{\epsilon})} \right], \quad (21)$$

а в случае сильного рассеяния

$$\eta = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \frac{5}{N(E_F)} \left(\frac{dN(E)}{dE} \right)_{E_F} \frac{a' + b'T/T_D + c'(T/T_D)^2}{\rho^2}, \quad (22)$$

где параметры a' , b' , c' , согласно (18)–(20), отличаются от параметров a , b , c в соотношении (13).

Таким образом, экспериментальные данные относительно концентрационных и температурных зависимостей R_s и Q_s позволяют определить характер рассеяния в сплаве и концентрационную зависимость производной плотности электронных состояний на уровне Ферми.

Согласно Кэмпбеллу [7], для поликристаллического Ni $\eta = -4,6 \cdot 10^{-8}$ А/(Гс·см·К²); отсюда, используя экспериментальные данные для R_s и ρ Ni, для параметра

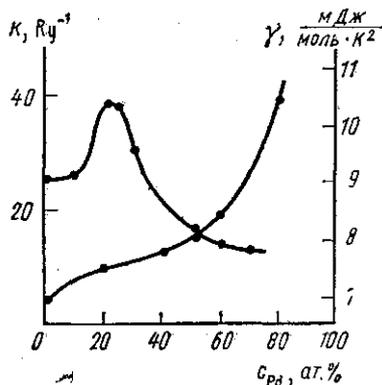
$$k = \frac{\eta}{\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \frac{5R_s}{\rho^2}} = \frac{1}{N(E_F)} \left(\frac{dN(E)}{dE} \right)_{E_F} + \frac{1}{5(E_F - \bar{\epsilon})} \quad (23)$$

нетрудно получить $k \approx 6Ry^{-1}$. Согласно недавно проведенным экспериментальным исследованиям АЭХ и АЭНЭ на монокристаллических образцах Ni и сплавов Ni–Pd [14], для Ni $\eta = -20,8 \times 10^{-8}$ А/(Гс·см·К²), откуда $k = 25,5 Ry^{-1}$. В рамках интерполяционной схемы расчета электронной структуры Ni [13] величина $\left(\frac{1}{N(E_F)} \left(\frac{dN}{dE} \right)_{E_F} \right)$ является весьма чувствительной к параметрам

расчета и по порядку величины составляет $\left| \frac{1}{N} \frac{dN}{dE_F} \right| \sim 100 Ry^{-1}$, что удовлетворительно согласуется с выражением (23), если учитывать модельный характер данной теории. Результаты концентрационной зави-

симости параметра k для сплавов Ni—Pd [14] совместно с экспериментальными данными для удельной теплоемкости [15] приведены на рисунке. По этим данным k составляет $\sim 20 \text{ Ry}^{-1}$, а так как k обратно пропорциональна полуширине зоны носителей АЭХ ω , то отсюда следует, что $\omega \sim 0,05 \text{ Ry}$, что соответствует оценкам характерной полуширины пика d -зоны.

Для Ni $\eta < 0$ и $R_s < 0$, поэтому $k = \left(\frac{1}{N(E_F)} \frac{dN}{dE} + \frac{1}{5(E_F - \bar{\epsilon})} \right) > 0$, т. е. уровень Ферми в Ni должен находиться в области энергии, меньшей соответствующей максимуму плотности состояний, тогда как, согласно расчетам электронной структуры Ni [16] и Ni—Pd [17, 18], dN/dE и $(E_F - \bar{\epsilon}) > 0$, что противоречит полученным данным. С другой стороны, в работе [19] рассчитана зонная структура Ni методом присоединенных плоских волн, объясняющая в отличие от ранее выполненных расчетов экспериментальные данные относительно эффекта



де Гааза—ван Альфена, зависимости магнитного момента на атом от давления и другие данные. По этому расчету уровень Ферми в Ni находится при энергии, меньшей вершины зоны, т. е. в согласии с приведенным выше анализом. Результаты, представленные на рисунке,

Зависимость от концентрации Pd параметра

$$k = \frac{1}{N(E_F)} \left(\frac{dN(E)}{dE} \right)_{E_F} + \frac{1}{5(E_F - \bar{\epsilon})}$$

и коэффициента γ электронного вклада в теплоемкость [15] для сплавов Ni—Pd

также свидетельствуют в пользу предлагаемого положения уровня Ферми в Ni слева от максимума $N(E)$, т. е. $(E_F - \bar{\epsilon}) < 0$. Действительно, при добавлении Pd, согласно данным по теплоемкости, $N(E_F)$ увеличивается, причем если при концентрации палладия $c_{Pd} \sim 20$ ат. % происходит резкое изменение dN/dE (максимум в зависимости k от c_{Pd} и точка перегиба в зависимости γ от c_{Pd}), то при $c_{Pd} > 20$ ат. % уровень Ферми приближается к вершине зоны, в силу чего $N(E_F)$ увеличивается; это приводит к возрастанию γ и падению k . Таким образом, полученные данные свидетельствуют о положении уровня Ферми в Ni и сплавах Ni—Pd ($c_{Pd} \leq 70$ ат. %) слева от максимума на кривой плотности состояний.

Согласно расчетам по интерполяционной схеме для Fe [13], $\frac{1}{N(E_F)} \frac{dN}{dE}$ примерно в 10 раз меньше, чем для Ni. Поэтому параметр η для Fe должен быть существенно меньше, чем для Ni, что соответствует экспериментальным данным [7]. Следует отметить, что для металлов и сплавов, у которых носители АЭХ и АЭНЭ принадлежат зонам с различной поляризацией спинов, величина параметра η определяется суммой вкладов η^+ и η^- , которые в силу возможных различных знаков R_s и dN/dE (как в случае Fe [20]) могут быть либо одинакового знака, либо противоположного, что усложняет сопоставление теории с экспериментом. Кроме этого, к настоящему времени практически не существует экспериментальных исследований АЭХ,

АЭНЭ, термоэдс, сопротивления для одних и тех образцов, за исключением системы Ni—Pd [14].

Экспериментальные исследования Q_s и R_s могут также дать информацию о температурной и концентрационной зависимостях положения уровня Ферми в сплаве. Действительно, согласно (5),

$$\eta = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{R_s}{\rho^2} \right)_{E_F} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{R_s}{\rho^2} \right) \left(\frac{\partial E_F}{\partial T} \right)^{-1}. \quad (24)$$

Определяя из температурных зависимостей R_s и ρ значение производной $\frac{\partial}{\partial T} \frac{R_s}{\rho^2}$, получаем по формуле (24) значение $\partial E_F / \partial T$. В частности, таким способом для Ni нами получено при $T=350$ К $(\partial E_F / \partial T)_{\text{эксп}} = 0,6 \cdot 10^{-15}$ эрг/град, тогда как по расчетам [21] $(\partial E_F / \partial T)_{\text{Ni}} = 0,33 \cdot 10^{-15}$ эрг/град.

Аналогично можно по экспериментальным данным определить и значение $\partial E_F / \partial c$, так как

$$\eta = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{|e|} \frac{\partial}{\partial c} \left(\frac{R_s}{\rho^2} \right) \left(\frac{\partial E_F}{\partial c} \right)^{-1}. \quad (25)$$

Для Ni—Pd $\eta < 0$ и $R_s < 0$, следовательно, из (25) вытекает, что с увеличением концентрации Pd уровень Ферми сдвигается в сторону больших энергий.

В заключение отметим, что не учтенная в модели зависимость матричных элементов СОВ и одноузельных матриц рассеяния от энергии, как правило, существенно слабее, чем зависимость плотности состояний от энергии, и поэтому может лишь улучшить количественное согласие теории с экспериментом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Кондорский Е. И. // ЖЭТФ. 1963. 45. С. 511—521. [2] Васильева Р. П., Кадыров Я. Я., Язлев С. // ФММ. 1975. 39. С. 524—527. [3] Berger L. // Phys. Rev. 1972. 5B. P. 1862—1870. [4] Абельский Ш. Ш. // ФММ. 1964. 18. С. 631—632. [5] Волошинский А. Н., Рыжанова Н. В. // ФММ. 1975. 40. С. 7—14. [6] Волошинский А. Н., Рыжанова Н. В. // ФММ. 1976. 41. С. 903—909. [7] Campbell I. A. // J. of Magn. and Magn. Mat. 1979. 12. P. 31—33. [8] Кондорский Е. И., Ведяев А. В., Грановский А. Б. // ФММ. 1975. 40. С. 455—464. [9] Кондорский Е. И., Ведяев А. В., Грановский А. Б. // Там же. С. 903—909. [10] Грановский А. Б. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3, Физ. Астрон. 1975. 16. № 6. С. 711—720. [11] Волошинский А. Н., Савицкая Н. В. // ЖЭТФ. 1971. 61. С. 2018—2025. [12] Грановский А. Б., Кондорский Е. И. // ФММ. 1975. 39. С. 718—730. [13] Абдурахманов А. А., Абилова Н. А., Расулов А. Р. // Изв. СКНЦ. Сер. ест. наук. 1982. 3. С. 54—58. [14] Мяликгульев Г. М., Васильева Р. П., Стадник С. И. // ФММ. 1985. 59. С. 750—755. [15] Mackliet C. A., Schindler A. I. // J. Phys. Chem. Sol. 1963. 24. P. 1639—1644. [16] Connolly W. D. // Phys. Rev. 1967. 159. P. 415—426. [17] Inoue J., Shimizu M. // J. Phys. Soc. Jap. 1977. 42. P. 1547—1554. [18] Akai H. // J. Phys. Soc. Jap. 1982. 51. P. 468—474. [19] Anderson J. R. et al. // Phys. Rev. 1979. B20. P. 3172—3185. [20] Кондорский Е. И. // ЖЭТФ. 1968. 55. С. 558—565. [21] Mori N., Fukuda Y., Ukai T. // J. Phys. Soc. Jap. 1974. 37. P. 103—110.

Поступила в редакцию
03.12.85