

УДК 537.311.31

**ВКЛАД БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА И РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА
В ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ СПЛАВОВ Cu—Zn**

А. А. Кацнельсон, О. В. Крисько, В. М. Сионов, Т. В. Скоробогатова
(кафедра физики твердого тела)

Методом модельного потенциала проведен расчет остаточного электросопротивления сплава Cu — 15 ат. % Zn. Установлено аномальное влияние размерного эффекта на остаточное электросопротивление сплавов Cu—Zn (его понижение).

Принято считать, что электросопротивление металлов и твердых растворов ρ определяется комбинацией валентного и размерного факторов и растет при увеличении различия в валентностях компонент и в размерах их атомов [1]. Дальний порядок должен заметно (на 20—30%) уменьшать электросопротивление, а ближний порядок в отсутствие аномалий должен также уменьшать электросопротивление, но на заметно меньшую величину (до 10%). Теоретические расчеты ρ на базе широко распространенных псевдопотенциалов [2] не приводят к разумному согласию с экспериментом, особенно для переходных металлов, и поэтому теоретический анализ возможного влияния различных факторов на электросопротивление проводился в основном для выяснения природы аномалий ρ , таких как рост ρ при отжиге деформированных твердых растворов [3]. С появлением новых псевдопотенциалов [4, 5] возник интерес к проведению теоретического анализа изменений электросопротивления растворов за счет как размерного эффекта, так и изменений в ближнем порядке. Целью данной работы является установление некорректности некоторых из общепринятых положений на базе проведения теоретического анализа вклада этих факторов на примере сплавов Cu—Zn.

Расчет проводился методом псевдопотенциалов с использованием параметров ближнего порядка и размерного эффекта, найденных экспериментально [6]. При определении формфактора псевдопотенциала для непереходного металла использовался псевдопотенциал [2], для благородного металла псевдопотенциал [4], экранирование псевдопотенциала проводилось в модели [5], нерезонансная часть рассчитывалась в квазилокальном приближении, резонансная — в полной нелокальной теории. Расчет ρ проводился по известной формуле

$$\rho = \frac{3\pi\Omega_0 m}{8\hbar e^2 E_F} c_A c_B \int_0^2 \sum_i \alpha(\rho_i) e^{iq\rho_i} |\Delta W(q) - (qA_Q) \bar{W}(q)|^2 x^3 dx. \quad (1)$$

Результаты расчета оказались следующими. Электросопротивление неупорядоченных твердых растворов, обусловленное различием валентности компонент,

$$\rho_n^0 = \frac{3\pi\Omega_0 m}{8\hbar e^2 E_F} c_A c_B \int_0^2 |\Delta W(q)|^2 x^3 dx \quad (2)$$

оказалось равным 2,8 мкОм·см, обязанное размерному эффекту,

$$\rho_{nr^3} = \frac{3\pi\Omega_0 m}{8\hbar e^2 E_F} c_A c_B \int_0^2 [-2\Delta W(q) \bar{W}(q) \langle qA_Q \rangle_{\theta, \varphi} + |\bar{W}(q)|^2 \langle qA_Q \rangle_{\theta, \varphi}^2] x^3 dx \quad (3)$$

равно —0,6 мкОм·см, за счет ближнего порядка — также —0,6 мкОм·см. Найденное расчетом значение ρ близко к экспериментальному ($\rho_{\text{эксп}} = 2,6$ мкОм·см). Это дает нам право проанализировать и вклад размерных факторов в ρ .

Полученные данные означают, что как размерный эффект, так и ближнее упорядочение сплава Cu—Zn приводит к заметному (более чем на 20%) уменьшению ρ . Это является достаточно неожиданным. Так, существенно большим, чем общепринятые значения, оказалось изменение ρ за счет ближнего порядка. Однако еще более интересен эффект значительного уменьшения ρ за счет комбинации размерного и валентного факторов, которые раньше в литературе по существу не обсуждались.

Отметим, что в других твердых растворах величина этого эффекта может стать еще заметнее, поскольку она зависит от фактора $\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c}$, входящего в выражение для A_Q ($A_Q \sim \frac{(1+\sigma)}{3(1-\sigma)} \frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c} \frac{Q}{Q^2}$) (согласно правилу Юм-Розери, даже в неограниченных твердых растворах $\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c} = 0,4$, в то время как для Cu—Zn $\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c} = 0,18$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Блатт Ф. Д. Физика электронной проводимости в твердых телах. М., 1971.
 [2] Anilatu A. O. E. // Phys. Rev. 1973. В8. P. 3542—3553. [3] Иверонова В. И., Кацнельсон А. А. Ближний порядок в твердых растворах. М., 1977. [4] Dagens L. // J. Phys. F.: Metal Phys. 1976. 6. P. 1801—1817. [5] Юрьев А. А., Ватолин Н. А. // Изв. АН СССР. Металлы. 1984. № 5. С. 44—50. [6] Силов В. М., Скоробогатова Т. В., Кацнельсон А. А., Крисыко О. В. Деп. ВИНТИ № 4926. М., 1985.

Поступила в редакцию
09.06.87

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1988. Т. 23, № 2

УДК 537.533.35

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭМИТТЕРА НА РАЗРЕШАЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ СКАНИРУЮЩЕГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА

С. Д. Алекперов, С. И. Васильев, С. П. Молчанов

(кафедра квантовой радиофизики)

Рассмотрены условия, при которых параметры зондирующего эмиттера позволяют получить максимальное пространственное разрешение сканирующего туннельного микроскопа. Описана методика получения эмиттеров с заданными свойствами.

Среди существующих методов изучения поверхности твердых тел сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) занимает особое место, поскольку дает возможность исследовать структуру и электронные свойства поверхности в атомном масштабе [1, 2].

Принцип работы СТМ основан на явлении туннелирования электронов между проводящим острием малого радиуса (эмиттером) и исследуемой поверхностью.

Предельное пространственное разрешение СТМ определяется в основном минимальным радиусом эмиттера и его механической жесткостью. Для типичных эмиттеров [3] механическая жесткость в продольном и поперечном направлениях оказывается достаточно малой, поэтому механические, тепловые и квантовые флуктуации эмиттера могут существенно ухудшить разрешение СТМ.

В настоящей работе рассматриваются условия, при которых параметры эмиттера позволяют получить наилучшее разрешение СТМ, и описывается оптимальная методика изготовления таких эмиттеров.

Для качественной оценки радиуса острия воспользуемся теорией, изложенной в работе [4], которая дает следующее выражение для отношения амплитуд неровностей поверхности и наблюдаемого СТМ-профиля:

$$\Delta d/h_s = \exp[-\pi^2(d+R)/a^2K_0], \quad (1)$$

где Δd — амплитуда неровностей наблюдаемого СТМ-профиля, h_s — амплитуда неровностей поверхности, d — расстояние от туннельного острия до поверхности, R — радиус туннельного острия, a — период неровностей поверхности, $K_0 = (2m/\hbar^2)\Phi$, m — масса электрона, \hbar — постоянная Планка, Φ — эффективная работа выхода электронов. Отношение (1) близко к единице при условии

$$d < R < K_0 a^2,$$

которое определяет возможность применения СТМ для исследования топографии поверхности с заданным разрешением.