

УДК 548:537.621

ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ И ЭФФЕКТ ХОЛЛА АМОРФНЫХ СПЛАВОВ $Cu_{1-x}Zr_x$ В $s-d$ -МОДЕЛИ (ПРИБЛИЖЕНИЕ КОГЕРЕНТНОГО ЛОКАТОРА)

А. В. Ведяев, А. Б. Грановский, И. Х. Халилов, С. А. Ниналалов,
Д. Х. Имамназаров, М. М. Гехтман (мл.)

(кафедра магнетизма)

В рамках приближения когерентного локатора для $s-d$ -модели с учетом недиагонального беспорядка рассчитаны электронная структура, электросопротивление и коэффициент Холла аморфных сплавов $Cu_{1-x}Zr_x$. Результаты расчета концентрационной зависимости электросопротивления и коэффициента Холла согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Для интерпретации экспериментальных данных относительно явлений переноса в аморфных сплавах на основе переходных металлов (ПМ) в настоящее время используется обобщенная модель Фабера—Займана, которая базируется на концепции слабого рассеяния $s-p$ -подобных носителей тока, а участием в переносе d -электронов пренебрегается [1]. Хотя в ряде работ (см., напр., [2, 3]) показано, что такой подход позволяет объяснить концентрационную зависимость сопротивления $\rho(x)$ или температурную зависимость сопротивления $\rho(T)$ некоторых аморфных сплавов, его применение к сплавам ПМ—ПМ с незаполненными d -состояниями вызывает принципиальные трудности. Во-первых, эти сплавы характеризуются сравнительно высоким сопротивлением $\rho \geq 150$ мкОм·см, указывающим на то, что рассеяние не является слабым. Во-вторых, у многих из этих систем коэффициент Холла R при изменении состава меняет знак с отрицательного на положительный, что противоречит исходной модели. Для устранения этого противоречия привлекается концепция аномальной дисперсии [1, 4], обусловленной эффектами $s-d$ -гибридизации. В-третьих, при возможном участии d -состояний в проводимости возникает значительный произвол в выборе исходных параметров модели, и в частности эффективной валентности сплава [1, 2], так как электронная структура сплава не рассчитывается, а считается известной.

В данной работе используется другой, в значительной степени устраняющий указанные выше недостатки, подход к расчету явлений переноса в аморфных сплавах ПМ—ПМ, базирующийся на приближении когерентного потенциала (ПКП). Как известно [5], ПКП успешно применяется для расчета кинетических эффектов кристаллических сплавов ПМ, для которых неприменима концепция слабого рассеяния. Последовательное обобщение ПКП на случай топологически разупорядоченных систем связано с существенными трудностями (см., напр., [6]). Поэтому в настоящей работе использована следующая, простая в вычислительном отношении схема. Сначала в рамках ПКП, а именно в приближении когерентного локатора, для $s-d$ -модели с учетом недиагонального беспорядка рассчитывается одночастичная функция

Грина эффективного сплава, в котором интеграл перескока принимает не одно или три, как в кристаллическом сплаве, а непрерывный ряд значений, задаваемый гауссовой функцией распределения, соответствующей парной функции распределения атомов аморфного сплава [7, 8]. Определенная таким образом электронная структура аморфного сплава затем используется для расчета явлений переноса, исходя из формулы Кубо по методике, аналогичной разработанной в ПКП для кристаллических сплавов.

Расчитанные по этой схеме концентрационные зависимости ρ и R аморфных сплавов $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x$ хорошо согласуются с экспериментальными данными во всем диапазоне составов.

1. Электронная структура в s-d-модели аморфного сплава

Гамильтониан s-d-модели неупорядоченного сплава A_xB_y ($y=1-x$) можно записать в следующем виде [5]:

$$H = \sum_{m \neq n} h_{mn}^s a_{ms}^+ a_{ns} + \sum_n \epsilon_n^s a_{ns}^+ a_{ns} + \sum_{m \neq n} h_{mn}^d a_{md}^+ a_{nd} + \sum_n \epsilon_n^d a_{nd}^+ a_{nd} + \sum_{m,n} \gamma_{mn} (a_{ms}^+ a_{nd} + a_{md}^+ a_{ns}), \quad (1)$$

где s и d — индексы зон, ϵ_n с вероятностью x и y принимает значения ϵ^A и ϵ^B соответственно, $h_{mn}^{s(d)}$ — интегралы перескока, γ_{mn} — матричные элементы гибридизационного потенциала, причем для расчета спектра можно ограничиться диагональными элементами гибридизационного потенциала — γ_{nn} . Интеграл перескока зависит от сорта атомов, занимающих узлы m и n , а также от расстояния между этими атомами. В приближении Шибы [9] h_{mn} факторизуется: $h_{mn} = \xi_m \bar{h} \xi_n$, где ξ_n^2 пропорционально ширине зоны n -й компоненты. В кристаллическом состоянии \bar{h} принимает одно значение, а в аморфном диспергировано около некоторого среднего значения \bar{h} , причем характер распределения \bar{h} можно описать гауссовой функцией [7]

$$Q(h) = (2\pi\omega)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{(h-\bar{h})^2}{2\omega^2} \right\}, \quad (2)$$

параметр ω которой находится из парной функции распределения атомов. Такой подход позволяет описать пространственное распределение атомов, задаваемое экспериментально определяемой парной корреляционной функцией.

Композиционно-усредненную функцию Грина сплава будем искать в ПКП с учетом недиагонального беспорядка в следующем виде:

$$G(k, z) = \begin{vmatrix} l^{ss}(z) - \epsilon^s(k) & -\gamma \\ -\gamma & l^{dd}(z) - \Sigma_2 \epsilon^d(k) \end{vmatrix}, \quad (3)$$

где $l^{\alpha\alpha}$ — эффективный локатор, Σ_2 — недиагональный когерентный потенциал, а $\epsilon^s(k)$ и $\epsilon^d(k)$ — «затравочный» закон дисперсии для s- и d-состояний.

Для самосогласованного нахождения топологически усредненных значений когерентного локатора, Σ_2 и функции Грина \bar{G} используем условие ПКП обращения в нуль T -матрицы рассеяния аморфного сплава:

$$\int \langle (t_n)_1^{s(d)} \rangle Q(h) dh = 0; \quad \int \langle (t_n)_2^d \rangle Q(h) dh = 0, \quad (4)$$

$$(t_n)_1^s = \frac{l^{ss} - M_n^{ss}}{1 - (l^{ss} - M_n^{ss}) G_1^{ss}}; \quad (t_n)_2^s = 0, \quad (5)$$

$$(t_n)_1^d = \frac{l^{dd} - M_n^{dd}}{1 - (l^{dd} - M_n^{dd}) G_1^{dd} - (h - \bar{h} \Sigma_2) G_2^{dd} Z_0}, \quad (6)$$

$$(t_n)_2^d = \frac{h - \bar{h} \Sigma_2}{1 - (l^{dd} - M_n^{dd}) G_1^{dd} - (h - \bar{h} \Sigma_2) G_2^{dd} Z_0}, \quad (7)$$

где $M_n^{\alpha\alpha} = (z - \epsilon_n^\alpha) / (\epsilon_n^\alpha)^2$, Z_0 — координационное число, t_1 и t_2 — диагональные и недиагональные части матрицы рассеяния [10], а G_1^{ss} , G_1^{dd} , G_2^{dd} в выражениях (5) — (7) определяются следующим образом:

$$G_1^{ss}(z) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k \int \frac{\delta(E - \epsilon^s(k)) dE}{l^{ss}(z) - E - \gamma^2 [l^{dd}(z) - \Sigma_2 E]^{-1}}, \quad (8)$$

$$G_1^{dd}(z) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k \int \frac{\delta(E - \epsilon^d(k)) dE}{l^{dd}(z) - \Sigma_2 E - \gamma^2 [l^{ss}(z) - E]^{-1}}, \quad (9)$$

$$G_2^{dd}(z) = \frac{l^{dd}(z) G_1^{dd}(z) - 1}{Z_0 \Sigma_2}. \quad (10)$$

2. Электропроводность и коэффициент Холла

В рамках ПКП расчет кинетических коэффициентов базируется на формуле Кубо, причем для кристаллических сплавов с короткодействующим потенциалом рассеяния двухчастичная функция Грина в ПКП равна произведению одночастичных функций Грина [5]. Применительно к аморфным сплавам такое приближение означает пренебрежение вертексной поправкой (транспортного множителя в выражении для ρ), что представляется оправданным для сплавов ПМ—ПМ с короткодействующим потенциалом рассеяния. При расчетах ρ и R в s - d -модели сплавов обычно не учитываются [11, 12] межзонные матричные элементы скорости $v_{sd} = \partial \gamma(k) / \partial k$ ($\hbar=1$), которые, однако, могут играть существенную роль в явлениях переноса [4]. С учетом этих вкладов выражение для электропроводности σ и коэффициента Холла R примут вид (детали расчета даны в работе [13]):

$$\sigma = \sigma_{ss} + 2\sigma_{sd} + \sigma_{dd} + 2\sigma'_{sd}, \quad (11)$$

где

$$\sigma_{ss} = 2 \frac{2e^2}{3\pi\Omega} \int d\eta \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{ss}^2 [\text{Im} \bar{G}_{ss}(k, \eta^+)]^2, \quad (12)$$

$$\sigma_{dd} = 10 \frac{2e^2}{3\pi\Omega} \int d\eta \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{dd}^2 [\text{Im} \bar{G}_{dd}(k, \eta^+)]^2, \quad (13)$$

$$\sigma_{sd} = \sqrt{20} \frac{2e^2}{3\pi\Omega} \int d\eta \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k v_{ss} v_{dd} [\text{Im} \bar{G}_{sd}(k, \eta^+)]^2, \quad (14)$$

$$\sigma'_{sd} = \sqrt{20} \frac{2e^2}{3\pi\Omega} \int d\eta \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \sum_k \{ 2v_{ss}v_{sd} \operatorname{Im} \bar{G}_{ss}(k, \eta^+) \operatorname{Im} \bar{G}_{sd}(k, \eta^+) + \\ + 2v_{dd}v_{sd} \operatorname{Im} \bar{G}_{dd}(k, \eta^+) \operatorname{Im} \bar{G}_{sd}(k, \eta^+) + v_{sd}^2 \operatorname{Im} \bar{G}_{ss}(k, \eta^+) \operatorname{Im} \bar{G}_{dd}(k, \eta^+) \}, \quad (15)$$

$$R = \frac{\sigma_{xy}(B)}{\sigma_{xx}^2 B}, \quad (16)$$

$$\sigma_{xy} = \left(-\frac{e^3 B}{\pi^2 c \Omega} \right) \int d\eta \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \left\{ \sum_{\substack{k \\ \alpha\beta}} c_{\alpha\beta} M_{\alpha\alpha}^{-1} v_{\alpha\alpha} v_{\beta\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(k, \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k, \eta)}{\partial \varepsilon_\alpha(k)} + \right. \\ + 2\sqrt{20} \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} M_{\alpha\alpha}^{-1} v_{\alpha\alpha} v_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\alpha}(k, \eta) \frac{\partial R_{\alpha\beta}(k, \eta)}{\partial \varepsilon_\alpha(k)} + \\ + \sqrt{20} \sum_{\substack{k\alpha\beta \\ \alpha \neq \beta}} \frac{\partial^2 \gamma(k)}{\partial k^2} v_{\alpha\alpha} \left[2v_{\beta\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(k, \eta) \frac{\partial R_{\alpha\alpha}(k, \eta)}{\partial \varepsilon_\alpha(k)} + \right. \\ \left. + v_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\alpha}(k, \eta) \frac{\partial R_{\beta\beta}(k, \eta)}{\partial \varepsilon_\alpha(k)} \right] \}, \quad (17)$$

где f — фермиевская функция, Ω — объем системы, $c_{ss}=2$,

$$c_{dd}=10, \quad c_{sd}=c_{ds}=\sqrt{20}; \quad \Gamma_{\alpha\beta}(k, \eta) = \operatorname{Im} \bar{G}_{\alpha\beta}(k, \eta),$$

$$R_{\alpha\beta}(k, \eta) = \operatorname{Re} \bar{G}_{\alpha\beta}(k, \eta); \quad M_{\alpha\alpha}^{-1} = \frac{\partial^2 \varepsilon_\alpha(k)}{\partial k^2}; \quad v_\alpha = \frac{\partial \varepsilon_\alpha(k)}{\partial k},$$

$$\bar{G}_{ss}(k, z) = \{ l^{ss} - \varepsilon_s(k) - \gamma^2 [l^{dd} - \Sigma_2 \varepsilon_d(k)]^{-1} \}^{-1}, \quad (18)$$

$$\bar{G}_{dd}(k, z) = \{ l^{dd} - \Sigma_2 \varepsilon_d(k) - \gamma^2 [l^{ss} - \varepsilon_s(k)]^{-1} \}^{-1}, \quad (19)$$

$$\bar{G}_{sd} = \bar{G}_{ds}(k, z) = \gamma \{ [l^{ss} - \varepsilon_s(k)] [l^{dd} - \Sigma_2 \varepsilon_d(k)] - \gamma^2 \}^{-1}. \quad (20)$$

3. Численный расчет ρ и R сплавов Cu-Zr

В табл. 1 приводятся значения исходных параметров полуширин зон W и их центров тяжести ε (в эВ) для чистых компонентов сплава Cu и Zr , использованных для расчета электронной структуры Cu-Zr .

Таблица 1

	W_d	W_s	ε_s	ε_d	γ
Cu	3,1	17,6	-8,2	-10,1	1,2
Zr	8,6	11,6	-5,9	-5,0	0,9

Для затравочной плотности состояний s -электронов примем полуэллиптическую форму

$$\rho_0(E) = \frac{2}{\pi W^2} [W^2 - E^2]^{1/2}, \quad (21)$$

а для d -состояний используем рассчитанную методом ЛМТО негибридизованную плотность состояний Cu . Для упрощения расчетов примем, что $\gamma = x\gamma^{\text{Cu}} + (1-x)\gamma^{\text{Zr}}$, $v_{sd} = (\gamma/W_s)v_{ss}$ и

$$\frac{1}{N} \sum_k \delta(E - \varepsilon_\alpha(k)) v_\alpha^2 = \frac{2(v_\alpha^m)^2}{\pi W_\alpha} \left[1 - \left(\frac{E}{W_\alpha} \right)^2 \right]^{3/2}, \quad (22)$$

где $v_\alpha^m = (a/\sqrt{3})W_\alpha$, a — среднее межатомное расстояние в сплаве.

На рис. 1 приведены рассчитанные описанным выше методом кривые плотностей состояний аморфных сплавов Cu-Zr трех различных составов. Стрелками показаны положения уровней Ферми. На вставке

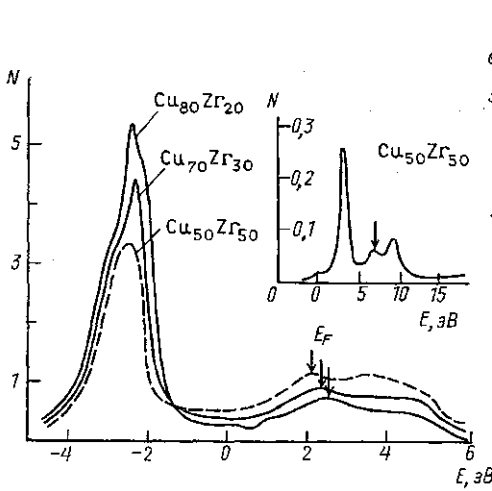


Рис. 1. Зависимость плотности состояний аморфных сплавов $\text{Cu}_x\text{Zr}_{1-x}$ от энергии. Вертикальные линии указывают на положение уровня Ферми сплава. На вставке представлены результаты расчета методом ЛМТО плотности состояний сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ [14]

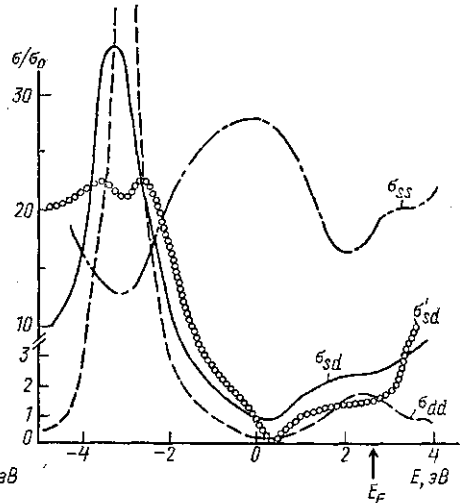


Рис. 2. Зависимость парциальных вкладов в электропроводность от энергии для сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$; $\sigma_0 = (4v_m^2 e^2) / (3\pi^2 \Omega)$

представлены результаты расчета плотности состояний сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ методом ЛМТО в приближении атомных сфер для кластера из 1500 атомов [14], хорошо согласующиеся с экспериментальными данными по фотоэмиссионным спектрам (см. [7, 14]). Как видно из рис. 1, результаты выполненного в локаторном подходе ПКП расчета находятся в количественном соответствии с результатами расчета более трудоемким в вычислительном отношении методом работы [14]. Плотность состояний аморфных сплавов Cu-Zr на уровне Ферми определяется d -состояниями и возрастает при увеличении содержания Zr в сплаве.

Результаты расчетов парциальных вкладов в электропроводность (см. выражения (11) — (15)) и результирующей электропроводности σ сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ в зависимости от положения уровня Ферми даны на рис. 2. Из этого рисунка следует, что вклад d -состояний (σ_{dd}) резко увеличивается при смещении уровня Ферми в сторону d -пика Cu , что связано с высокими значениями плотности состояний при этих энергиях, и при любых положениях уровня Ферми вклад σ'_{sd} , связанный с

межзонными матричными элементами скорости, одного порядка с гибридным вкладом σ_{sd} и имеет близкую с ним энергетическую зависимость. При истинном положении уровня Ферми (показан на рис. 2 стрелкой) основным вкладом в σ является вклад s -состояний (σ_{ss}), хотя вклад d -состояний и гибридные вклады σ_{sd} , σ'_{sd} не пренебрежимо малы. По-видимому, это связано с тем, что, несмотря на малый вклад в плотность состояний s -электронов, их затухание, в силу относительно слабого рассеяния, значительно меньше, чем для d -электронов. Результаты расчета остаточного электросопротивления ρ аморфных сплавов $\text{Cu}_x\text{Zr}_{1-x}$ и имеющиеся экспериментальные данные, приведенные в обзоре [1], даны в табл. 2. Имеет место хорошее согласие теории и эксперимента.

Таблица 2

x	90	80	70	60	50	45	27,5	20
$\rho_{\text{теор}}$, мкОм·см	159	165	170	170	168	168	160	149
$\rho_{\text{эксп}}$, мкОм·см [1]	—	—	175; 178	181; 183	177; 178	172; 173	159	—

Результаты расчета парциальных вкладов в недиагональную часть тензора электропроводности σ_{xy} представлены на рис. 3, а концентрационной зависимости константы Холла R — на рис. 4. Прежде всего

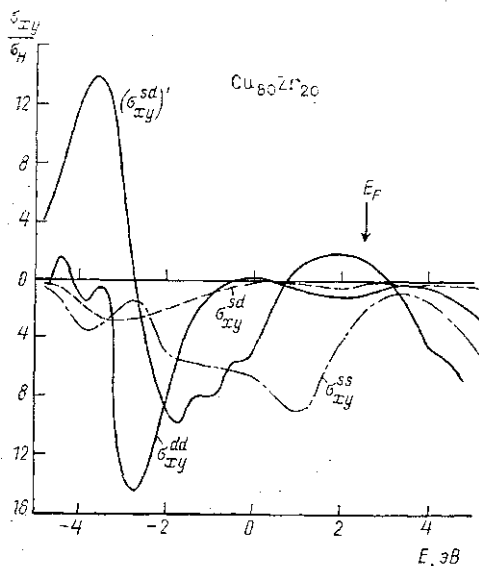


Рис. 3. Зависимость парциальных вкладов в недиагональную часть тензора электропроводности σ_{xy} от энергии для сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{20}$; $\sigma_H = (-2v_m^4 e^3 H) / (9\pi^3 c \Omega)$

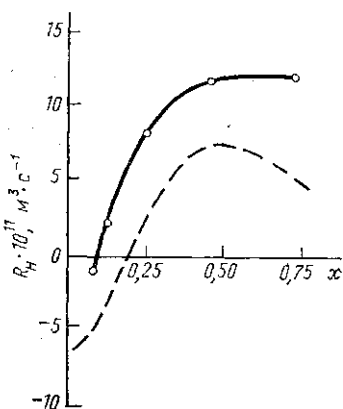


Рис. 4. Концентрационная зависимость коэффициента Холла сплавов $\text{Cu}-\text{Zr}$: штриховая линия — результаты расчета, сплошная — эксперимент [15]

следует отметить весьма сложную зависимость от энергии парциальных вкладов в σ_{xy} , причем не коррелирующую с зависимостью от энергии плотности состояний. Вклад σ_{xy}^{dd} сравнительно мал во всем диапа-

зоне энергий, за исключением края d -пика Cu , и поэтому знак и величина R определяются вкладом s -состояний σ_{xy}^{ss} и гибридными вкладами σ_{xy}^{sd} , $(\sigma_{xy}^{sd})'$. Смена знака σ_{xy} и R (см. рис. 4) при изменении положения уровня Ферми или при изменении состава сплава происходит в силу различной энергетической зависимости и противоположных знаков вклада, связанного с межзонными матричными элементами скорости $(\sigma_{xy}^{sd})'$, и вкладов σ_{xy}^{ss} и σ_{xy}^{sd} . Это согласуется с концепцией Хоусона—Моргана об изменении знака R в аморфных сплавах ПМ [4] за счет s — d гибридных эффектов.

Несмотря на модельный характер расчета, полученная концентрационная зависимость R в целом согласуется с экспериментальными данными (см. рис. 4), что можно рассматривать как дополнительное подтверждение применимости предлагаемого метода для расчета электронной структуры и кинетических явлений аморфных сплавов ПМ—ПМ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Howson M. A., Gallagher B. L.//Phys. Rep. 1988. 170, N 5. P. 265.
 [2] Paja A.//Phys. Stat. Solidi (b). 1990. 160, N 2. P. K123. [3] Stepanyuk V. S., Katsnelson A. A., Trushin O. S. et al.//Phys. Stat. Solidi (b). 1990. 160, N 2. P. K117. [4] Howson M. A., Morgan G. J.//Phil. Mag. 1985. B51, N 4. P. 439.
 [5] Ведяев А. В., Котельникова О. А., Николаев М. Ю., Стефанович А. В. Фазовые переходы и электронная структура сплавов. М., 1986. [6] Itoh M., Fresardt R., Beck H.//J. Phys. Condens. Matter. 1990. 2. P. 2687. [7] Djordjevic R., Elliot R. J., Fujiwara T.//J. Phys. C. 1979. 12. P. 2519. [8] Батырев И. Г., Кацнельсон А. А., Никифорова Л. А.//ФММ. 1984. 58, № 4. С. 646. [9] Shiba K.//Progr. Theor. Phys. 1971. 46, N 1. P. 77. [10] Braeter H., Eifrig Th., Kirsten E.//Phys. Stat. Solidi (b). 1973. 59, N 2. P. 693. [11] Brouers F., Vedyayev A. V.//Phys. Rev. 1972. B5, N 2. P. 348. [12] Bhattacharya A. K., Brauwiers M., Brouers F., Joshi S. K.//Phys. Rev. 1976. B13, N 12. P. 5214. [13] Имамназаров Д. Х. Деп. в УзНИИТИ № 1251-Уз90 от 24.05.90. [14] Krey U., Ostebrmeuer H., Zwick J.//Phys. Stat. Solidi (b). 1987. 144. P. 203. [15] Shulte A., Haenck W., Fritch G., Luscher E.//Phys. Rev. 1989. B40, N 6. P. 3581.

Поступила в редакцию
25.03.91