

сплава Bi—8 ат. % Sb серой вызывает увеличение концентрации электронов и уменьшение концентрации дырок. В сплаве, содержащем 0.02 ат. % S, при $77 \text{ K} < T < 140 \text{ K}$ реализуется один тип проводимости, на что указывает независимость коэффициента Холла от температуры. При более высоких температурах наблюдается возбуждение электронов из валентной зоны в зону проводимости. Появление дырок обуславливает уменьшение абсолютной величины коэффициента Холла с ростом температуры и вызывает появление экстремума в зависимости $\alpha(T)$.

При наличии текстуры $\{10\bar{1}2\}$ коэффициент Холла сплавов, в которых процессы переноса определяются только электронами, равен $R = A/ne$ (где $A = 0.7$ — ориентационный фактор, n — концентрация электронов, $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл). Данное выражение позволяет рассчитывать концентрацию электронов в сплавах, содержащих 0.01 и 0.02 ат. % S, при 77 К и определить величину коэффициента отдачи серы в сплаве Bi—8 ат. % Sb. Расчет показал, что $\eta = 0.25$.

Таким образом, в быстрозакаленных фольгах тройных сплавов Bi—8 ат. % Sb—S формируется текстура $\{10\bar{1}2\}$, а сера является донором, коэффициент отдачи которой равен 0.25.

Список литературы

- [1] Гицу Д. В., Иванов Г. А., Веракса В. И., Королевский Б. И., Федорко А. С. // Изв. АН СССР, неорг. материалы. 1971. Т. 7. № 6. С. 1063—1064.
- [2] Majkova E., Cerrenak J., Krempasky J., Dunaj P. // Phys. Stat. Sol. (b). 1989. V. 153. N 2. P. K147—K149.
- [3] Глазов В. М., Ятманов Ю. В. // Изв. АН СССР, неорг. материалы. 1986. Т. 22. № 1. С. 36—40.
- [4] Шепелевич В. Г. // Изв. АН СССР, неорг. материалы. 1988. Т. 24. № 4. С. 542—545.
- [5] Шепелевич В. Г. // Изв. АН СССР, неорг. материалы. 1989. Т. 25. № 4. С. 689—690.
- [6] Физическое металловедение / Под ред. Р. У. Кана и П. Хаазена. М., 1987. Т. 2. 684 с.
- [7] Мирошниченко И. С. Закалка из жидкого состояния. М., 1982. 169 с.
- [8] Вассерман Г., Гревен И. Текстуры металлических материалов. М., 1969. 656 с.

Белорусский государственный
университет им. В. И. Ленина
Минск

Поступило в Редакцию
3 апреля 1991 г.

© Физика твердого тела, том 33, № 10, 1991
Solid State Physics, vol 33, № 10, 1991

О ПРИРОДЕ КОРРЕЛЯЦИИ МУИДЖИ В СПЛАВАХ Ni—P

В. С. Степанюк, А. А. Кацнельсон, Г. М. Калибаева, А. Сас

Как известно, аморфные сплавы подразделяются на две большие группы. Для одной из них характерна обычная «металлическая» зависимость электросопротивления от температуры с положительным температурным коэффициентом электросопротивления. Вторая группа характеризуется отрицательным температурным коэффициентом электросопротивления. Было показано [1], что эти группы отличаются и по величине электрического сопротивления. Для первой из этих групп $\rho < 150 \text{ мкОм} \times \text{см}$, для второй $\rho > 150 \text{ мкОм} \cdot \text{см}$.

Нами [2] был проведен расчет электросопротивления и его температурной зависимости для сплавов Ni—P и показано, что сплавы состава $\text{Ni}_{85}\text{P}_{15}$ и $\text{Ni}_{75}\text{P}_{25}$ относятся к различным группам. Нормальное поведение электросопротивления характерно для первого из этих сплавов, аномальное — для второго. В соответствии с корреляцией Муиджи для первого

из них $\rho \approx 104$ мкОм·см для второго $\rho \approx 175$ мкОм·см, причем данные, полученные в результате расчета, оказались достаточно близкими к экспериментальным.

Целью данной работы было выявление методом молекулярной динамики, использованным нами и в [2], различий в субмикроструктуре указанных выше сплавов, возможно, объясняющих различие в величине электросопротивления и в его температурной зависимости. Для этого методом молекулярной динамики [3] (использован NVE ансамбль, взаимодействие между частицами описано потенциалами Морзе) система из 256 частиц была сначала нагрета до 2000 К, затем охлаждена до 1600 и 300 К. При каждой из указанных температур после 10 000 шагов термостабилизации (с шагом 10^{-15} с) были рассчитаны координаты атомов, парциальные функции радиального распределения и многогранники Вороного. Результаты расчета основных характерных типов многогранников Вороного (в процентах от числа атомов) для сплавов $Ni_{85}P_{15}$ и $Ni_{75}P_{25}$, находящихся в аморфном состоянии (при 300 К), приведены в таблице (в этой таблице использованы известные обозначения для многогранников Вороного $n_1 n_2 n_3 n_4$, где n_1, n_2, n_3, n_4 — соответственно число треугольников, четырехугольников, пятиугольников и шестиугольников, составляющих грани многогранников Вороного).

Доли (в %) типов многогранников вороного, полученные компьютерным моделированием для $Ni_{85}P_{15}$ и $Ni_{75}P_{25}$ при 300 К

		$Ni_{85}P_{15}$				$Ni_{75}P_{25}$					
		Тип многогранника									
		икосаэдроподобный	028.	036.	044.	0608	икосаэдроподобный	028.	036.	044.	0608
Ni		22	23	19	10	1	29	23	10	2	—
P		13	37	24	5	—	9	33	14	2	—
		21	25	21	9	1	24	26	11	2	—

Из таблицы видно, что доля многогранников икосаэдрического типа и типа антипризмы Архимеда (028. .) примерно одинакова для обоих аморфных сплавов. Практически отсутствуют многогранники типа ОЦК (0608). Наши исследования показали, что при увеличении температуры доля этих многогранников заметно не изменяется. Наиболее значительным оказалось различие в долях многогранников типа ГЦК (согласно [4], ГЦК-конфигурации характеризуются многогранниками Вороного типа 0.36. . и 0.44. .). Подобных многогранников для сплава $Ni_{85}P_{15}$ примерно в два-три раза больше, чем для $Ni_{75}P_{25}$. Это означает, что в сплавах Ni—P электросопротивление мало и обладает нормальной температурной зависимостью, если доля микрообластей кристаллографического типа достаточно велика (в нашем случае она составляет около 30 %). Понижение доли этих областей может быть причиной роста электросопротивления и появления аномалий в его температурной зависимости.

Таким образом, если обнаруженная корреляция между микроструктурой и электросопротивлением присуща сплавам металл—металлоид, появляется возможность прогнозирования электрических свойств, обладая лишь информацией о микроструктуре.

Результаты более обширных исследований будут представлены позднее.

Авторы благодарны О. С. Трушину за полезные обсуждения работы.

Список литературы

- [1] Mooij H. // Phys. Stat. Sol. (a). 1973. V. 17. P. 521.
 [2] Stepanyuk V. S., Szasz A., Katsnelson A. A., Trushin O. S. // J. Non-Cryst. Solids. 1990. V. 125. P. 139—142.

- [3] Хеерман Д. // Компьютерное моделирование в теоретической физике. М.: Наука, 1989. 190 с.
- [4] Полухин В. А., Ватолин Н. А. // Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985. 325 с.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
10 апреля 1991 г.

© Физика твердого тела, том 33, № 10, 1991
Solid State Physics, vol. 33, № 10, 1991

МАГНИТНЫЕ АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В АМОРФНЫХ КРЕМНИИ И ГЕРМАНИИ

Э. Л. Нагаев

Анализ экспериментальных данных по электрическим и оптическим свойствам a -Si и a -Ge приводит на первый взгляд к удивительному выводу: хотя эти материалы слабые магнетики, их свойства качественно во многом сходны с магнитными полупроводниками. У кристаллических Si и Ge такое сходство отсутствует. Сказанное прежде всего относится к изотропному отрицательному магнетосопротивлению, наблюдаемому практически во всех магнитных полупроводниках [1]. Такое магнетосопротивление наблюдается и в a -Ge и в a -Si [2, 3], хотя оно как минимум на два порядка ниже, чем в магнитных полупроводниках. В кристаллических Ge и Si магнетосопротивление анизотропно и положительно. В [4] у аморфных полупроводников было обнаружено изотропное фотомagnetосопротивление, знак которого противоположен знаку темнового магнетосопротивления. В [5] наблюдалось очень сильное влияние магнитного поля на люминесценцию a -Si: чрезвычайно слабое поле 30 Гс усиливало ее на вполне ощутимую величину $\sim 1\%$.

Такое поведение a -Si и a -Ge можно объяснить, если допустить, что внутри этих материалов имеются области, обладающие свойствами сильных магнетиков. Этими областями могут быть поверхности пор, неизбежно присутствующих в аморфных материалах. У атомов на поверхности пор s - p -связи, направленные внутрь поры по нормали к поверхности, болтающиеся. Однако болтающиеся орбитали, принадлежащие соседним атомам с поверхности поры, перекрываются друг другом в какой-то степени. В результате этого между такими атомами возникают обменные взаимодействия с характерной энергией, малой по сравнению с энергией химической s - p -связи. Таким образом, поверхность поры с болтающимися связями становится сильным магнетиком, в котором должно происходить упорядочение спинов неспаренных s - p -электронов. Экспериментальные данные, которые бы свидетельствовали о ферромагнетизме поверхности пор, отсутствуют. Поэтому естественно допустить в качестве альтернативы, что из-за нерегулярности формы поры ее поверхность представляет собой дефектный антиферромагнетик или спиновое стекло. Существование магнитного порядка при конечных температурах гарантируется в такой двумерной системе конечностью числа ее атомов.

Тип магнитного упорядочения поры может радикально измениться, если на поверхности поры появится дополнительный электрон. Он может перейти из валентной зоны, тогда пора выступает как акцептор, или из зоны проводимости, тогда пора выступает как донор. Этот электрон может сделать ферромагнитной либо всю пору, либо ее часть, в которой он и локализуется. Последнее означало бы ферронную автолокализацию электрона в созданной им самим ферромагнитной микрообласти, впервые рассмотренной в [6] (о ферронах см. подробнее в [1]).