

Остаточное электросопротивление разбавленных сплавов никеля

© Ю.Ю. Циовкин

Институт развития образования,
Екатеринбург, Россия

E-mail: tsiovkin@gmail.com

(Поступила в Редакцию 23 сентября 2013 г.
В окончательной редакции 6 декабря 2013 г.)

В рамках четырехтоковой модели проводимости методом кинетического уравнения с использованием *ab initio* подходов при определении рассеивающего потенциала выполнен количественный расчет остаточного электросопротивления ферромагнитных разбавленных сплавов на основе никеля. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных позволило разделить вклады в остаточное сопротивление от рассеяния на неоднородностях примесного кулоновского потенциала и обменного взаимодействия.

1. Введение

Вычисления остаточного электросопротивления (ОС) магнитных сплавов на протяжении многих лет привлекают внимание различных групп исследователей. Один из первых подходов сформулирован в рамках двухтоковой модели проводимости [1,2]. Результатом выполненных расчетов стало введение двух каналов проводимости для каждой из ориентаций спина (ρ^\uparrow и ρ^\downarrow) и смешанного канала проводимости $\rho^{\uparrow\downarrow}$, соответствующего возможному процессу рассеяния электрона проводимости с переворотом спина. Но полученное в работах [1,2] формальное решение кинетического уравнения без учета реального механизма рассеяния не позволяет конкретизировать $\rho^{\uparrow\downarrow}$. Так, например, при нуле температур переворот спина электрона возможен лишь в результате его рассеяния на неоднородностях потенциала спин-орбитального взаимодействия. Но для переходных металлов соответствующий потенциал исчезающе мал [3] и не может привести к заметному вкладу в ОС. Поэтому при расчетах ОС ферромагнитных сплавов обычно принимается $\rho^{\uparrow\downarrow} \rightarrow 0$.

Попытки более последовательного учета механизмов рассеяния электронов в магнитных сплавах были приняты как в модельных, так и в *ab initio* подходах. Так, с использованием правила сумм Фриделя в рамках $s-d$ -обменной модели и *ab initio* данных о зонной структуре металлов в работе [4] был выполнен расчет ОС ряда разбавленных сплавов на основе железа и никеля. *Ab initio* подход к расчетам ОС (при отождествлении времени релаксации одноэлектронного уровня и транспортного времени) магнитных сплавов реализован в цикле работ, обобщенных в обзоре [5].

Конкретизировать и вычислить $\rho^{\uparrow\downarrow}$ не удастся ни в одном из отмеченных подходов, и при сопоставлении результатов выполненных расчетов ОС с экспериментальными данными потребовалось введение дополнительного параметра теории [1]: $\alpha = \rho^\downarrow / \rho^\uparrow$. Однако при определении величины этого параметра для одних и тех же сплавов в различных модельных подходах,

включая и *ab initio* подходы [2,4–6], возникают весьма существенные расхождения (в 8–10 раз), что указывает на явные противоречия, заложенные в предлагаемые расчетные схемы. Надежное же определение параметра α из экспериментальных данных также не представляется возможным, так как не существует ни прямых, ни косвенных способов соответствующих измерений ОС в различных каналах проводимости в сплавах.

Несколько другой подход к решению задачи расчета ОС магнитных сплавов может быть использован, если опираться на двухполосную модель проводимости Мотта [7]. Согласно Мотту, рассеянные электроны проводимости в переходных металлах переходят в частично заполненную d -полосу и выключаются из процессов переноса. Это предположение позволило объяснить значительную разность ОС сплавов переходных и непроводящих металлов. Действительно, так как вероятность перехода рассеянного электрона прямо пропорциональна значению плотности состояний (ПС) принимающей полосы, переходы подвижных s -электронов в d -полосу становятся наиболее вероятными, поскольку отношение значений ПС d - и s -полос на уровне Ферми порядка 10–20. Вследствие этого наблюдаемые значения сопротивления в переходных металлах оказываются в 10–20 раз больше, чем в простых металлах.

Ранее модель проводимости Мотта была успешно использована для прямого расчета ОС всех немагнитных разбавленных сплавов с участием $3d$ -, $4d$ - и $5d$ -переходных металлов [8,9], что позволило впервые доказать линейную зависимость приведенного ОС сплавов от квадрата модуля $s-d$ -элемента T -матрицы рассеяния, предсказанную в работах Кона и Латтинжера [10]. Целью настоящей работы является проведение подобного расчета для сплавов, обладающих магнитным порядком, тем более что двухполосный характер проводимости для ферромагнитных металлов и их сплавов был доказан экспериментально [11,12], а для чистых Fe, Co и Ni отношения σ_s / σ_d были получены равными 11.67, 19.10 и 25.27 соответственно [12].

2. Модель

Предположим, что спин-орбитальное взаимодействие пренебрежимо мало и процессы рассеяния электронов с переворотом спина фактически невероятны. Предположим далее, что s -электроны проводимости рассеиваются на хаотически распределенных по узлам кристаллической решетки электрических полях ионов металлов и могут совершать внутри- и межполосные переходы. Гамильтониан, описывающий такое рассеяние в ферромагнитных сплавах при нуле температур (без переворота спина), может быть записан в виде [3,4]

$$\hat{H} = \sum_{l,\sigma} E_l^\sigma a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{n,l,l'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}',r_n)} v(n) D(n) a_{l\sigma}^+ a_{l'\sigma}. \quad (1)$$

Квантовое число l включает зонный индекс j ($j = s, d$) и волновой вектор \mathbf{k} . E_l^σ — невозмущенная энергия электрона с квантовым индексом l в полосе с ориентацией спина $\sigma = \uparrow (\downarrow)$. Величина $D_{ll'}^\sigma(n)$ имеет следующий вид:

$$D_{ll'}^\sigma(n) = \Delta V_{ll'}^\sigma(n) \mp \frac{1}{2} \Delta J_{ll'}^\sigma(n) \langle S^z \rangle. \quad (2)$$

Первое слагаемое, содержащее $\Delta V_{ll'}^\sigma(n)$, описывает обычное примесное рассеяние, обусловленное хаотичностью чередования ионов по узлам кристаллической решетки, а второе слагаемое — обменную часть примесного рассеяния.

При записи гамильтониана учтено, что периодическая (нерассеивающая) часть взаимодействия включена в E_l^σ , а $\Delta V_{ll'}^\sigma(n) = V_{ll'}^{A\sigma}(n) - V_{ll'}^{B\sigma}(n)$ и $\Delta J_{ll'}^\sigma(n) = J_{ll'}^A(n) - J_{ll'}^B(n)$; \mathbf{r}_n — радиус-вектор узла с номером n . Множитель $v(n) = c_A \alpha_B(n) - c_B \alpha_A(n)$ описывает хаотическое распределение ионов сплава по узлам кристаллической решетки; $\alpha_{A(B)}(n) = 1$, если узел с номером n занят ионом сорта $A(B)$, и равняется нулю в другом случае; $c_{A(B)}$ — концентрация компонента $A(B)$ сплава.

В гамильтониан (1) можно явно включить слагаемые, описывающие $s-d$ -гибридизацию. Но эффекты гибридации не меняют рассеивающей части гамильтониана и могут быть учтены в его периодической части [13].

Для расчетов ОС ферромагнитных сплавов воспользуемся методом обобщенного кинетического уравнения [10] и тождеством Свенсона [14]. Уравнение для неравновесной добавки f_j^σ к фермиевской функции распределения $f_l^{0\sigma}$ в линейном приближении по внешнему электрическому полю (\mathbf{F}) в пределе малой концентрации примеси имеет вид

$$\begin{aligned} 2\pi c \sum_{\mathbf{k}',j'} \delta(E_{\mathbf{k}j}^\sigma - E_{\mathbf{k}'j'}^\sigma) |T_{\mathbf{k}j\mathbf{k}'j'}^\sigma|^2 (f_{\mathbf{k}j}^\sigma - f_{\mathbf{k}'j'}^\sigma) \\ = e\hbar (\mathbf{F}, \mathbf{e}_{\mathbf{k}j}) \frac{\partial f_{\mathbf{k}j}^{0\sigma}}{\partial E_{\mathbf{k}j}} |v_{\mathbf{k}j}^\sigma|, \end{aligned} \quad (3)$$

где v_l^σ — скорость электрона, а $T_{ll'}^\sigma$ — матрица рассеяния. Полная система четырех уравнений для каждой из

полос записывается аналогично (3) с явным указанием зонных и спиновых индексов и отличается от уравнений, полученных ранее в работах [8,9], только наличием спинового индекса.

Использование подстановки

$$f_{\mathbf{k}j}^\sigma = e\hbar (\mathbf{F}, \mathbf{v}_{\mathbf{k}j}^\sigma) C_{\mathbf{k}j}^\sigma \frac{\partial f_{\mathbf{k}j}^{0\sigma}}{\partial E_{\mathbf{k}j}}, \quad (4)$$

и сведение полученной системы векторных кинетических уравнений (3) к алгебраической позволяют решить последнюю относительно искомого коэффициента $C_{\mathbf{k}j}^\sigma$. В результате находим

$$C_{\mathbf{k}j}^\sigma = \frac{I_{\mathbf{k}j'j'}^\sigma + K_{\mathbf{k}j'j}^\sigma + L_{\mathbf{k}j'j}^\sigma}{(I_{\mathbf{k}jj}^\sigma + K_{\mathbf{k}jj}^\sigma)(I_{\mathbf{k}j'j'}^\sigma + K_{\mathbf{k}j'j}^\sigma) - L_{\mathbf{k}jj}^\sigma L_{\mathbf{k}j'j}^\sigma}, \quad (5)$$

где

$$I_{\mathbf{k}jj}^\sigma = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k' \delta(E_{\mathbf{k}j}^\sigma - E_{\mathbf{k}'j}^\sigma) |T_{\mathbf{k}\mathbf{k}',jj}^\sigma|^2 (1 - \cos \widehat{v_{\mathbf{k}j}^\sigma, v_{\mathbf{k}'j}^\sigma}), \quad (6)$$

$$K_{\mathbf{k}j'}^\sigma = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k' \delta(E_{\mathbf{k}j}^\sigma - E_{\mathbf{k}'j'}^\sigma) |T_{\mathbf{k}j,\mathbf{k}'j'}^\sigma|^2, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} L_{\mathbf{k}j'j'}^\sigma = -\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k' \delta(E_{\mathbf{k}j}^\sigma - E_{\mathbf{k}'j'}^\sigma) |T_{\mathbf{k}j,\mathbf{k}'j'}^\sigma|^2 \\ \times \left| \frac{v_{\mathbf{k}'j'}^\sigma}{v_{\mathbf{k}j}^\sigma} \right| \cos(\widehat{v_{\mathbf{k}j}^\sigma, v_{\mathbf{k}'j'}^\sigma}). \end{aligned} \quad (8)$$

Первый интеграл (6) описывает внутризонное рассеяние. Вторым (7) и третьим (8) интегралами описывают межзонное рассеяние, сопровождающееся прямыми $j \rightarrow j'$ и обратными $j' \rightarrow j$ переходами токоносителей соответственно. Ω — объем элементарной ячейки.

Для непосредственного вычисления коэффициентов $C_{\mathbf{k}j}^\sigma$ остается лишь определить элементы T -матрицы рассеяния. В одноузельном и одноэлектронном приближении суммирование бесконечного ряда для T -матрицы может быть выполнено точно. В результате находим

$$|T_{ss}^\sigma|^2 = \frac{1}{A^\sigma} |D_{ss}^\sigma (1 - F_d^\sigma D_{dd}^\sigma) + D_{sd}^\sigma F_d^\sigma D_{ds}^\sigma|^2,$$

$$|T_{sd}^\sigma|^2 = \frac{1}{A^\sigma} |D_{sd}^\sigma|^2, \quad |T_{ds}^\sigma|^2 = \frac{1}{A^\sigma} |D_{ds}^\sigma|^2,$$

$$|T_{dd}^\sigma|^2 = \frac{1}{A^\sigma} |D_{dd}^\sigma (1 - F_s^\sigma D_{ss}^\sigma) + D_{ds}^\sigma F_s^\sigma D_{sd}^\sigma|^2,$$

$$A^\sigma = |(1 - F_d^\sigma D_{dd}^\sigma)(1 - F_s^\sigma D_{ss}^\sigma) + F_s^\sigma D_{sd}^\sigma F_d^\sigma D_{sd}^\sigma|^2, \quad (9)$$

где

$$F_j^\sigma = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(z - E_{\mathbf{k}j}^\sigma)} \quad (10)$$

— функция Грина электрона в j -полосе со спином σ .

Учет модельных предположений Мотта [7]

$$|F_s^\sigma D_{jj'}^\sigma| / |F_d^\sigma D_{jj'}^\sigma| \ll 1, \quad |F_s^\sigma D_{jj'}^\sigma| \ll 1$$

позволяет существенно упростить выражения (9) для элементов T -матрицы рассеяния, так что

$$|T_{ss}^\sigma|^2 = \frac{1}{A^\sigma} |D_{ss}^\sigma (1 - F_d^\sigma D_{dd}^\sigma) + D_{sd}^\sigma F_d^\sigma D_{ds}^\sigma|^2,$$

$$|T_{sd}^\sigma|^2 = \frac{|D_{sd}^\sigma|^2}{A^\sigma}, \quad |T_{ds}^\sigma|^2 = \frac{|D_{ds}^\sigma|^2}{A^\sigma}, \quad |T_{dd}^\sigma|^2 = \frac{|D_{dd}^\sigma|^2}{A^\sigma},$$

$$A^\sigma = |1 - F_d^\sigma D_{dd}^\sigma|^2. \quad (11)$$

Используя обобщенное определение тока

$$\mathbf{J} = \frac{e^2 \hbar}{3} \mathbf{F} \sum_{j,\sigma} n_j^\sigma \int dE C_{\mathbf{k}j}^\sigma (\mathbf{v}_{x\mathbf{k}j}^\sigma)^2 \frac{\partial f_{\mathbf{k}j}^{0\sigma}}{\partial E_{\mathbf{k}j}} g_j^\sigma(E_F) \quad (12)$$

(где n_j^σ — концентрация электронов, $g_j^\sigma(E_F)$ — значение ПС на уровне Ферми в j -полосе проводимости, а $\mathbf{v}_{x\mathbf{k}j}^\sigma$ — x -компонента скорости электрона), после интегрирования по \mathbf{k} для проводимости в s -полосе находим

$$\sigma_s = \frac{e^2 \hbar}{3} \left[n_s^\uparrow (\mathbf{v}_{xs}^\uparrow)^2 g_s^\uparrow(E_F) \frac{I_{dd}^\uparrow + K_{ds}^\uparrow + L_{sd}^\uparrow}{(I_{ss}^\uparrow + K_{sd}^\uparrow)(I_{dd}^\uparrow + K_{ds}^\uparrow) - L_{ds}^\uparrow L_{sd}^\uparrow} + n_s^\downarrow (\mathbf{v}_{xs}^\downarrow)^2 g_s^\downarrow(E_F) \frac{I_{dd}^\downarrow + K_{ds}^\downarrow + L_{sd}^\downarrow}{(I_{ss}^\downarrow + K_{sd}^\downarrow)(I_{dd}^\downarrow + K_{ds}^\downarrow) - L_{ds}^\downarrow L_{sd}^\downarrow} \right]. \quad (13)$$

Определим далее

$$S_s^\sigma = I_{dd}^\sigma + K_{ds}^\sigma + L_{sd}^\sigma, \quad S_d^\sigma = I_{ss}^\sigma + K_{sd}^\sigma + L_{ds}^\sigma,$$

$$[Q_{jj'}^\sigma] = \begin{pmatrix} I_{ss}^\sigma + K_{sd}^\sigma & L_{sd}^\sigma \\ L_{ds}^\sigma & I_{dd}^\sigma + K_{ds}^\sigma \end{pmatrix}$$

и предположим, что $g_s^\uparrow(E_F) \approx g_s^\downarrow(E_F)$ и $\mathbf{v}_{xs}^\uparrow \approx \mathbf{v}_{xs}^\downarrow$. Тогда выражение для сопротивления может быть записано в наиболее компактной форме

$$\rho_s = \frac{3}{n_s e^2 (\mathbf{v}_{xs})^2 g_s(E_F)} \frac{\det[Q_{sd}^\uparrow] \det[Q_{ds}^\downarrow]}{S_s^\uparrow \det[Q_{ds}^\uparrow] + S_s^\downarrow \det[Q_{sd}^\downarrow]}. \quad (14)$$

Легко заметить, что, опустив спиновые индексы в (14), получим

$$\rho_s = \frac{1}{2} \frac{3}{n_s e^2 (\mathbf{v}_{xs})^2 g_s(E_F)} \frac{\det[Q_{sd}]}{S_s}, \quad (15)$$

что совпадает с основным результатом, полученным в работах [8,9].

3. Результаты и обсуждение

Для вычисления ОС предположим далее, что вероятности обратных ($d \rightarrow s$)-переходов рассеянных электронов малы по сравнению с прямыми переходами и, следовательно, $L_{sd}^\sigma \rightarrow 0$. С другой стороны, так как значения интегралов (6)–(8) пропорциональны ПС принимающей полосы, можно считать, что $I_{ss}^\sigma \ll K_{sd}^\sigma \approx |T_{sd}^\sigma|^2 g_d^\sigma(E_F)$.

Тогда для ОС сплава в приближении $g_s^\uparrow(E_F) \approx g_s^\downarrow(E_F)$ и $\mathbf{v}_{xs}^\uparrow \approx \mathbf{v}_{xs}^\downarrow$ имеем

$$\rho \approx \frac{1}{g_s(E_F)} \frac{g_d^\uparrow(E_F) |T_{sd}^\downarrow|^2 g_d^\downarrow(E_F) |T_{sd}^\uparrow|^2}{g_d^\uparrow(E_F) |T_{sd}^\downarrow|^2 + g_d^\downarrow(E_F) |T_{sd}^\uparrow|^2}. \quad (16)$$

Для непосредственного расчета ОС и элементов T -матрицы рассеяния ($|T_{sd}^{\uparrow(\downarrow)}|^2$) воспользуемся простейшим приближением Томаса–Ферми для экранирующего потенциала [15–17]. В результате несложных преобразований, используя (16), для ОС сплавов получаем

$$\rho_s = \frac{3\pi c}{e^2 \hbar n_s \mathbf{v}_s^2 g_s} B^\sigma \times \frac{g_d^\uparrow(E_F) (\Delta D^\uparrow)^2 g_d^\downarrow(E_F) (\Delta D^\downarrow)^2}{g_d^\uparrow(E_F) (\Delta D^\uparrow)^2 |1 - M^\downarrow|^2 + g_d^\downarrow(E_F) (\Delta D^\downarrow)^2 |1 - M^\uparrow|^2}, \quad (17)$$

где

$$B^\sigma = \frac{1}{q \sqrt{4k_F^2 + (q^\sigma)^2}} \left(\frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega_0} \right), \quad M^\sigma = B^\sigma G_d^\sigma \Delta D^\sigma,$$

а q — радиус экранирующего потенциала, k_F^2 — квадрат фермиевского волнового вектора электрона.

Полученное выражение содержит ряд параметров, требующих определения. Большинство этих параметров характеризует матрицу-растворитель ($g_{s(d)}^{\uparrow(\downarrow)}(E_F)$, n_s , \mathbf{v}_s^2), и только один из них (ΔD^σ) описывает тип примеси. В соответствии с (2) ΔD^σ можно представить в виде $\Delta D^\sigma = \Delta Z^\sigma \mp \langle \Delta J^\sigma \rangle$, где ΔZ^σ — относительный избыточный заряд, вносимый примесным ионом в электрически нейтральную матрицу-растворитель, а $\langle \Delta J^\sigma \rangle$ — величина эффективного рассеивающего потенциала, обусловленного неоднородностью распределения по узлам кристаллической решетки сплава потенциала обменного взаимодействия.

Как было показано в работах [8,9], величина ΔZ может быть достаточно просто определена при использовании современных *ab initio* расчетных методик. Действительно, предположив, что исходная ячейка является электрически нейтральной, с использованием например, LMTO–ASA-методов [18–20] (например, пакета TB–LMTO–ASA 47), можно легко вычислить относительный избыточный заряд, вносимый примесным ионом в матрицу-растворитель.

Алгоритм такого расчета весьма прост. На первом шаге самосогласованным методом определяются зонная структура и волновые функции металла-растворителя. Далее один из ионов матрицы-растворителя заменяется примесным ионом и на основе волновых функций металла-растворителя вычисляется поток заряда через ячейку, содержащую примесь, что позволяет определить относительный избыточный заряд на 1% примеси. В данной схеме расчета не учитываются эффекты, связанные с искажением исходной решетки металла-растворителя за счет внедрения примесного иона, и эффекты, связанные

Абсолютные значения ОС и относительного избыточного заряда, рассчитанные прямым методом, и значения рассеивающего потенциала, восстановленные из экспериментальных данных

Параметр	Примесь								
	V	Nb	Mo	Rh	Pd	Ta	W	Ir	Pt
$\rho_{\text{exp}}, \mu\Omega \cdot \text{cm}$	4.4	5	6.4	1.8	0.2	5.2	6	3.8	0.8
$\rho_{\text{theor}}, \mu\Omega \cdot \text{cm}$	4.2	6.2	5.6	0.8	0.1	6.6	6.2	2.2	0.4
$\rho, \mu\Omega \cdot \text{cm}$ [4]	1.8	2.7	4.5	1.2	0.6				
ΔD_{exp}	1.61	1.81	2.15	0.99	0.33	1.85	2.05	1.51	0.65
ΔZ_{theor}	1.08	2.07	1.67	0.29	0.22	2.17	2.13	0.69	0.45

с обменным взаимодействием. Однако полученные ранее результаты для немагнитных сплавов [8,9] внушают определенный оптимизм относительно использования этой простой схемы для рассматриваемого случая ферромагнитных сплавов Ni.

Специфическая зонная структура Ni позволяет еще более упростить поставленную задачу. Поскольку d -полоса со спином вверх у Ni полностью заполнена, вероятность переходов рассеянных электронов в эту полосу исчезающе мала. Следовательно, для ОС приближенно имеем

$$\rho_s \approx \frac{3\pi c}{e^2 \hbar n_s v_s^2 g_s} B^{\downarrow 2} g_d^{\downarrow}(E_F) (\Delta D^{\downarrow})^2, \quad (18)$$

что позволяет провести прямое сопоставление эффективных рассеивающих потенциалов, полученных прямым расчетом и восстановленных из экспериментальных данных.

Для сплавов Ni с металлами ванадиево-танталовой группы рассчитанные и экспериментальные значения ОС весьма близки (см. таблицу). Для этих сплавов оценка флуктуирующей части обменного взаимодействия фактически постоянна и дает $\sim 30\%$ от величины полного рассеивающего потенциала. В этих сплавах внесение примесного атома не приводит к существенным изменениям флуктуирующей части обменного взаимодействия, так как параметры решеток растворителя и примесей различаются не критически. Также хорошее согласие полученных результатов, вероятно, обусловлено спецификой зависимости ОС от величины относительного избыточного заряда (см. рисунок), так как при больших ΔD значение ОС практически остается неизменным.

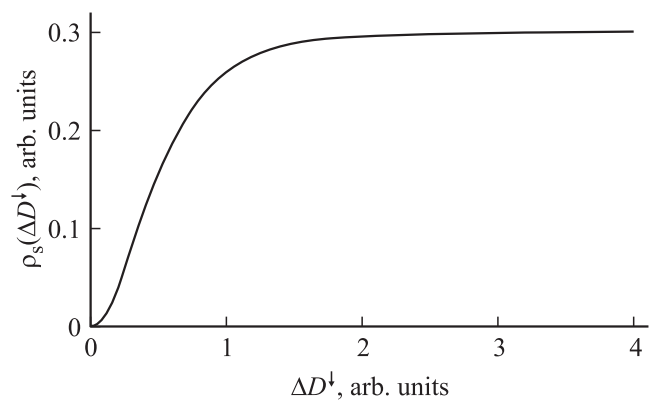
Для примесей платино-родиевой группы в матрице Ni полученные отношения $\rho_{\text{exp}}/\rho_{\text{theor}} \approx 2-3$. Это свидетельствует о значительной недооценке в используемом элементарном подходе к определению рассеивающего потенциала эффектов искажения решетки матрицы растворителя в результате внесения примеси и, как следствие, изменений флуктуирующей части обменного взаимодействия.

Конечно, расчетные результаты могут быть значительно улучшены ценой введения дополнительного параметра теории, характеризующего интенсивность рассеяния на неоднородностях обменного потенциала, но такой

шаг нарушит принятый в настоящей работе *ab initio* подход к определению рассеивающего потенциала. Существующие же *ab initio* методы вычисления параметров обменного взаимодействия дают весьма противоречивые результаты и существенно зависят от принятой схемы таких расчетов.

Полученные прямыми расчетными методами результаты для ОС разбавленных сплавов Ni могут быть улучшены также за счет последовательного учета искажений исходной решетки металла-растворителя вследствие внедрения примеси. Однако реализация адекватной расчетной схемы требует использования большой (64 или 128 атомов) исходной элементарной ячейки металла и сложных методов согласования. Ценой же таких улучшений является многократное увеличение объемов необходимых вычислений без изменения физической сущности.

Предложенная модель расчета ОС разбавленных ферромагнитных сплавов позволила с хорошей точностью определить его абсолютные значения для ряда сплавов на основе Ni без использования дополнительных искусственных параметров теории. Показано, что флуктуирующая часть обменного взаимодействия существенно зависит от того, насколько сильно примесный атом искажает матрицу-растворитель и является ли примесь подразмерной (*undersize*) или надразмерной (*oversize*). Причиной заметного расхождения расчетных и экспериментальных данных для некоторых сплавов, по всей вероятности, как раз и является пренебрежение искаже-



Приведенное ОС как функция ΔD^{\downarrow} для канала $\sigma = \downarrow$ в матрице Ni.

ниями решетки матрицы-растворителя за счет внедрения примесных атомов. С другой стороны, интерес может представлять возможность оценки вклада в ОС от рассеяния электронов проводимости, обусловленного неоднородностью распределения обменного потенциала, так как достоверные расчеты соответствующего потенциала в рамках существующих *ab initio* методов фактически невозможны.

В результате прямых вычислений ОС ферромагнитных сплавов показано, что полное сопротивление „параллельно включенных“ каналов проводимости с различной ориентацией спина нельзя рассматривать в рамках схемы параллельно включенных проводников или примитивной „эквивалентной“ схемы. Этот вывод непосредственно следует из полученной системы кинетических уравнений и невозможности введения классического транспортного времени для многополосных процессов рассеяния в переходных металлах и сплавах.

В заключение отметим, что предложенная четырехтоковая модель проводимости является в значительной степени универсальной и может быть использована для соответствующих расчетов ОС магнитных сплавов не только переходных металлов, но и сплавов с участием редкоземельных металлов.

Список литературы

- [1] A. Fert, I.A. Campbell. *J. Phys. F* **6**, 5, 849 (1976).
- [2] I.A. Campbell, A. Fert. In: *Handbook of ferromagnetic materials*. V. 3 / Ed. E.P. Wohlfarth. North-Holland, Amsterdam (1982). P. 747.
- [3] С.В. Вонсовский. *Магнетизм*. Наука, М. (1971). 1032 с.
- [4] V.Yu. Irkhin, Yu.P. Irkhin. *J. Magn. Magn. Mater.* **164**, 119, (1996).
- [5] I. Mertig. *Rep. Prog. Phys.* **62**, 237 (1999).
- [6] J.W.F. Dorleijn, A.R.J. Miedema. *J. Phys. F* **7**, 1, L23 (1977).
- [7] N.F. Mott. *Adv. Phys.* **13**, 51, 325 (1964).
- [8] Yu.Yu. Tsiovkin, A.N. Voloshinskii, V.V. Gapontsev, V.V. Ustinov. *Phys. Rev. B* **71**, 184 206 (2005).
- [9] Yu.Yu. Tsiovkin, A.N. Voloshinskii, V.V. Gapontsev, V.V. Ustinov. *Low Temp. Phys.* **32**, 8–9, 863 (2006).
- [10] J.M. Luttinger, W. Kohn. *Phys. Rev.* **109**, 1892 (1958).
- [11] P.O. Nilsson. In: *Solid state physics*. V. 29 / Eds F. Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich. Academic Press, N.Y.–London (1974). P. 139.
- [12] М.М. Носков. Оптические свойства некоторых переходных металлов и двухполосная модель проводимости. Препринт ИФМ АН СССР. Свердловск (1969). 16 с.
- [13] F. Brouers, A.V. Vedyayev. *Phys. Rev. B* **5**, 348 (1972).
- [14] R.J. Swenson. *J. Math. Phys.* **3**, 5, 1017 (1962).
- [15] J. Ziman. *The theory of transport phenomena in solids*. Oxford University Press, N.Y. (1960). 554 p.
- [16] K.N.R. Taylor, M.I. Darby. *Physics of rare earth solids*. Chapman and Hall, Ltd, London (1972). 330 p.
- [17] W.A. Harrison. *Electronic structure and the properties of solids: the physics of the chemical bond*. Dover Books of Physics. Dover Publ., N.Y., USA (1989). 586 p.
- [18] W. Kohm, L.J. Sham. *Phys. Rev.* **140**, 4A, 11 133 (1965).
- [19] O.K. Andersen. *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975).
- [20] R.O. Jones, O. Gunnarsson. *Rev. Mod. Phys.* **61**, 681 (1989).